UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MINAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MINERAL

TESE DE DOUTORADO

Classificação de maciços rochosos por meio de técnicas da estatística multivariada e inteligência artificial

AUTOR: ALLAN ERLIKHMAN MEDEIROS SANTOS

ORIENTADORA: PROF. DRª. MILENE SABINO LANA

CO-ORIENTADOR: PROF. DR. TIAGO MARTINS PEREIRA

Ouro Preto/MG

2021

UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MINAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MINERAL

CLASSIFICAÇÃO DE MACIÇOS ROCHOSOS POR MEIO DE TÉCNICAS DA ESTATÍSTICA MULTIVARIADA E INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL

AUTOR: **ALLAN ERLIKHMAN MEDEIROS SANTOS**

ORIENTADORA: **PROF ª. DRª. MILENE SABINO LANA**

CO-ORIENTADOR: **PROF. DR. TIAGO MARTINS PEREIRA**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mineral do Departamento de Engenharia de Minas da Escola de Minas da Universidade Federal de Ouro Preto, como parte integrante dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Mineral.

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: **LAVRA DE MINAS**

Ouro Preto/MG

2021

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

S237c Santos, Allan Erlikhman Medeiros.
Classificação de maciços rochosos por meio de técnicas da estatística multivariada e inteligência artificial. [manuscrito] / Allan Erlikhman Medeiros Santos. - 2021.
195 f.: il.: color., gráf., tab..

Orientadora: Profa. Dra. Milene Sabino Lana.
Coorientador: Prof. Dr. Tiago Martins Pereira.
Tese (Doutorado). Universidade Federal de Ouro Preto. Departamento de Engenharia de Minas. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mineral.
Área de Concentração: Lavra de Minas.

1. Geotecnia. 2. Aprendizagem de máquina. 3. Análise estatística multivariada. I. Lana, Milene Sabino. II. Pereira, Tiago Martins. III. Universidade Federal de Ouro Preto. IV. Título.

CDU 624.121:004.8

Bibliotecário(a) Responsável: Sione Galvão Rodrigues - CRB6 / 2526

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
REITORIA
ESCOLA DE MINAS
PROGRAMA DE POS-GRADUACAO EM ENGENHARIA MINERAL

FOLHA DE APROVAÇÃO

Allan Erlikhman Medeiros Santos

Classificação de maciços rochosos por meio de técnicas da estatística multivariada e inteligência artificial

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mineral da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de doutor

Aprovada em 20 de agosto de 2021

Membros da banca

Doutora Milene Sabino Lana - Orientadora (Universidade Federal de Ouro Preto)
Doutor André Monteiro Klen - Instituto Federal de Minas Gerais
Doutor Ivo Eyer Cabral - Universidade Federal de Ouro Preto
Doutor Luís de Almeida Prado Barcellar - Universidade Federal de Ouro Preto
Doutora Maria Giovana Parizzi - Universidade Federal de Minas Gerais

Milene Sabino Lana, orientadora do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito no Repositório Institucional da UFOP em 15/09/2021

Documento assinado eletronicamente por **Hernani Mota de Lima**, **COORDENADOR(A) DE CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MINERAL**, em 27/09/2021, às 16:36, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0 , informando o código verificador **0225633** e o código CRC **0B0AD354**.

R. Diogo de Vasconcelos, 122, - Bairro Pilar Ouro Preto/MG, CEP 35400-000
Telefone: - www.ufop.br

AGRADECIMENTOS

Primeiramente à Deus, pai de bondade, pela oportunidade maior que é o Dom da vida e a todas as outras que nos são enviadas incessantemente, e hoje em especial agradeço a oportunidade do estudo.

Aos meus pais, Rildo e Telma, pilares e exemplos em minha vida, que me apoiaram e orientaram em todos os momentos de minha caminhada acadêmica, do vestibular na Escola Técnica de Ouro Preto ao concurso do Doutorado no PPGEM, momentos decisivos e cruciais que vocês sempre me estenderam as mãos.

À minha companheira Denise, pelo zelo, paciência e carinho. Você não tem ideia do quanto me ajuda sempre. Foram vários momentos que pensei em desistir e que pensei que não seria capaz. Sempre você me afirmou que um dia esse projeto se concretizaria e eu, em todas as vezes, não acreditei, mas nutrido do seu carinho e confiança, conseguia reunir as forças necessárias e continuei a caminhada. Muito obrigado por tudo Dêzinha!

A minha irmã Ariane pela amizade, companheirismo, folga e carinho. Agradeço muito a você por tudo meu bem!

A minha eterna orientadora Professora Milene Sabino Lana, por toda paciência, confiança, ensinamentos e cuidado, que juntos formam a melhor orientação do mundo. Se não fosse a senhora Milene, nada disso teria sido possível, esse projeto nunca teria sido sequer idealizado, esses scripts não teriam sido escritos, esses modelos não teriam sido treinados e muito mesmo convergidos, nada disso existiria. A senhora é fonte de inspiração para todos nós! Muito obrigado por tudo!

Ao meu coorientador Professor Tiago Martins Pereira, por toda a orientação, paciência e confiança depositada em nós. Por me apresentar o mundo da ciência de dados, da estatística multivariada, da inteligência artificial e de que “temos que usar o bom senso sempre!”. Por me apresentar mais um significado da universidade, a união construtiva de diferentes cursos!

Aos professores Felipe Ribeiro Souza (UFOP) e José Aurélio Medeiros da Luz (UFOP) pelas ricas contribuições quando da qualificação desta tese.

Aos professores André Monteiro Klen (IFMG), Maria Giovanna Parisi (UFMG), Luis de Almeida Prado Bacellar (UFOP) e Ivo Eyer Cabral (UFOP) pelo aceite do convite e por todas as contribuições nesta tese.

Aos professores e técnicos administrativos do PPGEM/DEMIN, em especial a coordenadora do curso de Pós-Graduação em Engenharia Mineral, Prof.ª Christianne Lyra Nogueira.

Aos professores Ivo Eyer Cabral (UFOP) e José Margarida da Silva (UFOP), por todo apoio, auxílio e ensinamentos dedicados a mim durante minha caminhada acadêmica.
Aos meus sogros, Zezé e Beth e aos meus cunhados Elaine e Fernando, Marcos e Thaliene. Essa família linda que me acolheu em Ouro Preto.
Aos meus afilhados e amigos de alma, Bruno e Maristella, muito obrigado por tudo!
Aos meus queridos amigos, Guilherme Alzamora, Tamíris Fonseca e Paôlla Carvalho, que compartilham comigo as angústias e alegrias de existir.
Agradeço aos meus colegas de trabalho no Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFET-MG) por todo apoio no decorrer dessa pesquisa.
Aos amigos e colegas de trabalho que o CEFET-MG me deu ao longo dessa caminhada, em especial ao Alexander, Bruna, Fábio, Francisco, Hildor, Marcélio, Michel e Michelly.
Aos amigos da "Firma da Milene", colegas do mestrado, do doutorado de inúmeros projetos e por aí vai. Meu muito obrigado à Tatiana, Larissa, Pedro, Danielle, Juliano, Otávio e Davidson. Essa nossa firma é fera demais! Obrigado por tudo pessoal!
Agradeço a Universidade Federal de Ouro Preto, pelo ensino gratuito e de qualidade.
Agradeço a Escola de Minas, por mais uma vez me deixar fazer parte de sua história.

"*Não há classificação no universo que não seja arbitrária e conjectural*"

O idioma analítico de John Wilkins

Jorge Luis Borges

"*Estou escrevendo pra vocês de tão longe, tão longe... Esse longe é o meu agora. E o meu agora continua o agora de vocês. Diferente. Mas, continua*"

Carta, Cidade Ocupada

Ericson Pires

RESUMO

A presente pesquisa tem como objetivo a proposição de novos modelos para classificação de maciços rochosos brasileiros, baseados no sistema RMR. O banco de dados utilizado possui informações dos parâmetros básicos para obtenção do sistema *Rock Mass Rating* (RMR). Os modelos propostos são baseados em técnicas da estatística multivariada e técnicas de inteligência artificial. A seleção das variáveis foi feita a partir da análise fatorial. Os modelos de classificação foram treinados por meio de dois tipos de aprendizagem, a supervisionada e a não supervisionada. O processo de aprendizagem se baseia na identificação de padrões no comportamento das variáveis do banco de dados, estabelecendo modelos preditivos no processo de aprendizagem supervisionada e modelos descritivos na aprendizagem não-supervisionada. Portanto, na aprendizagem supervisionada a variável classe (*target*) deve ser fornecida ao algoritmo, já na aprendizagem não-supervisionada o algoritmo irá indicar os grupos (*clusters*) com base no comportamento das variáveis, posto isso os clusters são grupos constituídos de amostras similares, com variáveis com comportamento semelhante. Nos métodos supervisionados foram utilizadas as técnicas de redes neurais artificiais, *naïve Bayes*, *random forest* e máquinas de vetores de suporte. Para o modelo por aprendizagem não supervisionada foi utilizado o algoritmo *partitioning around medoids*. A utilização destes métodos quantitativos reduz a subjetividade dos sistemas propostos. O resultado da análise fatorial permitiu a identificação de três fatores comuns, Fator 1, relacionado à resistência e à alteração da rocha; Fator 3, relacionado ao grau de fraturamento do maciço rochoso e Fator 2, relacionado à condição e presença de água no maciço. Assim, a partir da análise fatorial foi feita a seleção das variáveis para o sistema de classificação. Posto isso, um número menor de variáveis foi utilizado, o que difere do sistema de classificação RMR. Os modelos treinados por aprendizagem supervisionada se adequaram à solução do problema abordado, com excelente desempenho para modelos preditivos, apresentando altas taxas de acurácia, precisão e eficácia. Os valores médios de acurácia dos modelos treinados foram de 0,81; 0,89; 0,87 e 0,89 para *naïve Bayes*, *random forest*, redes neurais artificiais e máquinas de vetores de suporte, respectivamente. Estes resultados mostraram a possibilidade de definir as classes do RMR com um número menor de variáveis, e que as variáveis selecionadas são realmente os parâmetros mais importantes para determinar a qualidade do maciço rochoso. O modelo treinado pela aprendizagem não supervisionada indicou a formação de 7 grupos, rotulados a partir da

interpretação dos valores das variáveis em cada grupo em conjunto com o valor da variável Pontuação. Os grupos formados foram a Classe A com maciços com resistência alta, pouco alterado, pouco fraturado e seco; Classe B com maciços com resistência média, pouco alterado, com fraturamento médio e seco; Classe C com maciços com resistência alta, pouco alterado, com fraturamento médio e molhado; Classe D com maciços com resistência baixa, muito alterado, pouco fraturado e seco; Classe E com maciços com resistência média, alteração média, com fraturamento médio e molhado; Classe F com maciço com resistência baixa, alteração alta, pouco fraturado e molhado; por fim a Classe G com maciço com resistência baixa, alteração alta, muito fraturado e molhado. O trabalho apresenta novas abordagens para lidar com sistemas de classificação de maciços rochosos, diminuindo a subjetividade, aumentando a seletividade dos parâmetros, reduzindo a dimensionalidade de bancos de dados geotécnicos e otimizando a aplicação de sistemas de classificação. Embora a matemática das técnicas aplicadas seja complexa, os resultados são de fácil interpretação e aplicação. Assim, acredita-se na confiabilidade dos modelos preditivos propostos, além da possibilidade de otimização por meio da utilização de bases de dados mais amplas.

Palavras-chave: classificação de maciços rochosos; aprendizagem de máquina; estatística multivariada; banco de dados geotécnico.

ABSTRACT

The objective of this research is to propose new models for the classification of Brazilian rock masses. The database used is compiled with basic parameters to obtain the Rock Mass Rating system. The proposed models are based on multivariate statistical techniques and artificial intelligence techniques. The selection of variables was done with factor analysis. Classification models were trained through two types of learning, supervised and unsupervised. The learning process is based on the identification of patterns in the database variables, establishing predictive models in the supervised learning process and descriptive models in unsupervised learning. Therefore, in supervised learning, the target variable must be provided to the algorithm, while in unsupervised learning, the algorithm will indicate clusters based on the behavior of the variables, therefore, clusters are groups made up of similar samples, with variables with similar behavior. In the methods for supervised learning, the techniques of artificial neural networks, naïve Bayes, random forest and support vector machines were used. For the model of unsupervised learning, the algorithm partitioning around medoids was used. The use of these quantitative methods reduces the subjectivity of the proposed systems. The results of the factor analysis allowed the identification of three common factors. Factor 1 represents the strength and weathering of the rock. Factor 3 represents the fracturing degree of the rock mass. Finally Factor 2 represents water flow conditions. Thus, based on the factor analysis, the variables were selected for the classification system. Fewer variables are used, comparing to the RMR system. The models trained by supervised learning were adapted to the solution of the problem addressed, with excellent performance for predictive models, presenting high rates of accuracy, precision and efficiency. The average accuracy values of the trained models were 0.81; 0.89; 0.87 and 0.89 for naïve Bayes, random forest, artificial neural networks, support vector machines, respectively. These results showed the possibility of reaching the RMR classes with a smaller number of variables, and it allows showing that the selected variables are really the important parameters to determine the quality of the rock mass. The model trained by unsupervised learning indicated the formation of 7 groups, labeled based on the interpretation of the values of the variables in each group together with the value of the *Score* variable. The groups formed were Class A, rock masses with high strength, low weathering, low fractured and dry; Class B, rock mass with medium strength, low weathering, with medium fracturing and dry; Class C, rock mass with high strength, low weathering, with

medium fracturing and wet; Class D, rock mass with low strength, high weathering, low fracturing and dry; Class E, rock mass with medium strength, medium weathering, with medium fracturing and wet; Class F, rock mass with low strength, high weathering, low fracturing and wet; finally the Class G, rock mass with low strength, high weathering, high fracturing and wet. The work presents a new approach to rock mass classification, decreasing subjectivity, increasing the selectivity of parameters, reducing the dimensionality of geotechnical databases and optimizing the application of classification systems. Although the mathematics of applied techniques is complex, the results are easy to interpret and apply. Thus, we believe in the reliability of the proposed predictive models, in addition to the possibility of optimization through the use of broader databases.

Keywords: rock mass classification; machine learning; multivariate statistics; geotechnical database.

LISTA DE FIGURAS

Figura 4.1 - Características das descontinuidades. Adaptado de ISRM (1981). 7

Figura 4.2 - Determinação do RQD por meio de um testemunho de sondagem. Modificado de DEERE & DEERE (1988)..... 10

Figura 4.3 – *Relação entre o p*erfil de *r*ugosidade e JRC. Modificado de BARTON & CHOUBEY (1977). 14

Figura 4.4 - Gráfico para determinação dos pesos em relação a Resistência à Compressão Uniaxial. Modificado de BIENIAWSKI (1989)..... 21

Figura 4.5 - Gráfico para determinação dos pesos em relação ao RQD. Modificado de BIENIAWSKI (1989)..... 22

Figura 4.6 - Gráfico para determinação dos pesos em relação ao Espaçamento entre as descontinuidades. Modificado de BIENIAWSKI (1989)..... 22

Figura 4.7 - Gráfico de relação entre o espaçamento das descontinuidades e o RQD. Modificado de BIENIAWSKI (1989). 23

Figura 4.8 - Relação entre o módulo de deformabilidade e o RMR. Modificado de BIENIAWSKI (1989)..... 24

Figura 4.9 - Diagrama de caminhos de um modelo fatorial ortogonal. Modificado de PEREIRA (2015). 32

Figura 4.10 - Processo de rotação ortogonal (HAIR *et al.,* 2009)..... 38

Figura 4.11 - Componentes do neurônio biológico. (Modificado de SHANMUGANATHAN & SAMARASINGHE, 2016). 50

Figura 4.12 - Neurônio de McCulloch-Pitts. BRAGA *et al.* (2000). 51

Figura 4.13 - Função *threshold*. 52

Figura 4.14 - Função sigmoide com o parâmetro β. 53

Figura 4.15 - Função tangente hiperbólica (*tanh*) com o parâmetro β. 54

Figura 4.16 - Funções de ativação Sigmoide(x) e Tanh(x). Modificado de NAMIN *et al.* (2009). 54

Figura 4.17 - Exemplos de arquiteturas de RNAs. (BRAGA *et al.*, 2000). 55

Figura 4.18 - Ilustração de uma rede MLP, com uma camada intermediária. Modificado de BRAGA *et al.* (2000). 56

Figura 4.19 - Ilustração do algoritmo *back-propagation* (BRAGA *et al.*, 2000). 58

Figura 4.20 - Ilustração do processo do algoritmo Rprop. Modificado de GÜNTHER & FRITSCH (2010). 60

Figura 4.21 - Representação de uma árvore de decisão e sua respectiva representação no espaço. Modificado de SILVA (2005). 61

Figura 4.22 - Funcionamento do algoritmo de Random Forest (Modificado de OSHIRO, 2013). 65

Figura 4.23 - Hiperplano de separação (w, b) para um problema de classificação em duas classes. 70

Figura 4.24 - Determinação da distância d entre os hiperplanos de separação. Modificado de HEARST *et al.* (1998). 71

Figura 4.25 - (a) Conjunto de dados não linear; (b) Fronteira não linear no espaço de entradas (Modificado de MÜLLER *et al*., 2001). 76

Figura 4.26 - Fronteira linear no espaço de características. (Modificado de MÜLLER *et al*., 2001). 76

Figura 4.27 - Partição *hold-out*. 81

Figura 4.28 - Curva ROC para diferentes modelos. 84

Figura 5.1 - Metodologia para avaliação da análise fatorial. 95

Figura 5.2 - Estrutura da ANN aplicada. 97

Figura 6.1 - Gráfico de barras para a classificação RMR. 101

Figura 6.2 - Distribuição das classes RMR após a correção do desbalanceamento. 102

Figura 6.3 - Screeplot para aplicação do Critério de KAISER (1958). 104

Figura 6.4 – Resultado da análise fatorial. 106

Figura 6.5 - Desempenho nas amostras de treino e teste para o modelo de ANN. 107

Figura 6.6 - Desempenho nas amostras de treino e teste para o modelo de RF. 108

Figura 6.7 - Desempenho nas amostras de treino e teste para o modelo de NB. 108

Figura 6.8 - Desempenho nas amostras de treino e teste para o modelo de SVM. 109

Figura 6.9 - Acurácia média dos modelos com intervalos de confiança. 110

Figura 6.10 - Eficiência das classes. 112

Figura 6.11 - Precisão das classes. 112

Figura 6.12 - Mapa de calor das distâncias entre as amostras. 116

Figura 6.13 - Resultado da seleção do número de grupos pelo método da silhueta. 117

Figura 6.14 - Resultado da seleção do número de grupos pelo método Elbow. 117

Figura 6.15 - Resultado do gráfico da silhueta. 118

Figura 6.16 - Visualização dos grupos formados. 119

Figura 6.17 - Variável Pontuação para cada grupo formado. 123

Figura 6.18 - Faixas de valores para classes considerando maciço seco. 124

Figura 6.19 - Distribuição da variável Pontuação, em classes, para maciços secos. 125

Figura 6.20 - Faixas de valores para classes considerando maciço com presença de água. 125

Figura 6.21 - Distribuição da variável Pontuação, em classes, para maciços com água. 126

Figura 6.22 - Relação entre o valor do RMR e a variável Pontuação. 127

Figura 6.23 - Árvore de decisão para a classificação de acordo com os grupos formados. ... 128

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 - Resistência dos maciços rochosos por meio do teste de martelo de geólogo. Adaptado da ISRM (1981). 8

Tabela 4.2 - Caracterização da alteração em maciços rochosos. Adaptado da ISRM (1981). ... 9

Tabela 4.3 - Caracterização das alterações da parede das descontinuidades de acordo com a ISRM (1981). 12

Tabela 4.4 - Principais sistemas de classificações de maciço rochosos. (Modificado de BIENIAWSKI, 1989). 16

Tabela 4.5 - Relação entre o RQD e a qualidade da rocha (DEERE *et al.,* 1967). 17

Tabela 4.6 - O Rock Mass Rating de acordo com BIENIAWSKI (1989). 18

Tabela 4.7 - Determinação do peso do parâmetro condições das descontinuidades, de acordo com BIENIAWSKI (1989). 19

Tabela 4.8 - Classes de orientação das descontinuidades em escavações de túneis. (Modificado de BIENIAWSKI, 1989). 20

Tabela 4.9 - Pesos para correção do RMR básico. (Modificado de BIENIAWSKI, 1989). 20

Tabela 4.10 - Classificação do maciço rochoso pelo RMR de acordo com BIENIAWSKI (1989). 21

Tabela 4.11 - Determinação de parâmetros de resistência com base no valor da classe do RMR. Modificado de BIENIAWSKI (1989). 23

Tabela 4.12 - Principais técnicas de aprendizado de máquinas. Modificado de LANTZ (2013). 27

Tabela 4.13 - Alguns trabalhos com aplicações de técnicas de aprendizado de máquina. 28

Tabela 4.14 - Relação entre os valores de KMO/MSA e sua interpretação (PEREIRA, 2015). 34

Tabela 4.15 - Métodos de clusterização mais utilizados. Modificado de CASSIANO (2014).41

Tabela 4.16 - Índices de concordância (PEREIRA, 2015). 44

Tabela 4.17 - Principais funções kernel e seus respectivos parâmetros. Modificado de LORENA & CARVALHO (2007). 79

Tabela 4.18 - Matriz de confusão. 81

Tabela 4.19 - Níveis de concordância para os valores do índice Kappa. Modificado de LANDIS & KOCH (1977). 84

Tabela 5.1 - Resumo dos objetivos e técnicas aplicadas em cada etapa da pesquisa. 88

Tabela 5.2 - Cabeçalho do banco de dados inicial. 89

Tabela 5.3 - Nomenclatura aplicada as variáveis do banco de dados inicial..... 89

Tabela 5.4 - Sistema de pesos aplicados para as variáveis. 91

Tabela 6.1 - Resultados do teste de esfericidade de Bartlett. 102

Tabela 6.2 - Resultados do KMO/MSA. 103

Tabela 6.3 - Comunalidades e especificidades das variáveis. 104

Tabela 6.4 - Matriz de cargas fatoriais rotacionada..... 105

Tabela 6.5 - Rotulação dos fatores. 106

Tabela 6.6 - Valores do Índice Kappa e AUC para os modelos. 111

Tabela 6.7 - Valores para eficiência e precisão de cada classe. 113

Tabela 6.8 - Diferença dos modelos com inserção das variáveis rugosidade e persistência. . 114

Tabela 6.9 - Testes da MANOVA – Ajuste Geral do Modelo. 119

Tabela 6.10 - Estatística descritiva de cada grupo..... 120

Tabela 6.11 - Descrição dos grupos formados. 122

Tabela 6.12 - Resultado da hierarquização dos grupos. 123

Tabela 6.13 - Faixas para os valores da variável pontuação. 126

LISTA DE SÍMBOLOS E SIGLAS (POR TEMA)

GERAL

AHP	*Analytic Hierarchy Process;*
ANN	Redes neurais artificiais (*Artificial Neural Networks*);
AUC	Área abaixo da curva ROC;
BQ	*Basic Quality Rock Mass;*
BTS	Teste de esfericidade de Bartlett;
DBSCAN	*Density based spatial clustering of applications with noise;*
DT	Árvores de decisão (*Decision Trees*);
Em	Modulo de deformação in situ;
FDM	*Fuzzy Delphi method;*
FN	Falso negativo;
FP	Falso positivo;
Gini	Índice de Gini;
GSI	*Geological Strength Index;*
ISRM	International Society for Rock Mechanics;
JRC	Coeficiente de rugosidade de descontinuidades;
KMO	Medida de adequação da amostra;
MLP	Modelo de McCulloch-Pitts;
MSA	*Measure of sampling Adequacy;*
NB	Naive Bayes;
NN	Vizinho mais próximo (*Nearest neighbor*);
PAM	*Partitioning Around Medoids;*
PESQ	*Probabilistic expert semi*
RF	*Random Forest;*
RMR	*Rock Mass Rating;*
RMS	*Rock Mass Strength;*
ROC	*Receiver Operating Characteristic;*
Rprop	*Resilient back propagation;*
RQD	*Rock Quality Designation;*
SMR	*Slope Mass Rating;*

SOM	Mapas auto-organizáveis (*Self organizing maps*);
SSE	*Sum of Squares of Errors*;
SVM	Máquinas de vetores de suporte (*Support vector machines*);
VN	Verdadeiro negativo;
VP	Verdadeiro positivo;

ESPAÇAMENTO DAS DESCONTINUIDADES

Jv	Contador volumétrico de juntas;
S_i	Espaçamento das juntas em metros para a referida família de juntas;
t	Tamanho do pedaço de rocha intacta considerada, normalmente 10 centímetros;
λ	Frequência de descontinuidades (número de descontinuidades por metro na *scanline*);

CRITÉRIO DE RESISTÊNCIA DE HOEK & BROWN (1980)

m_b	Constante de litotipo;
σ_1	Tensão principais maior;
σ_3	Tensão principais menor;
σ_c	Resistência à compressão uniaxial;
a	Constante para grau de fraturamento;
s	Constante para grau de fraturamento;

MODELO FATORIAL ORTOGONAL

$\hat{f}_j$	j-ésimo fator dado pelo método dos mínimos quadrados;
h_i^2	Soma dos efeitos dos fatores comuns (*comunalidade*);
F_m	Fatores comuns não observáveis;
Q_{ij}^2	Correlação parcial entre as variáveis;
R_{ij}	Correlação amostral entre as variáveis;
$\tilde{X}$	Vetor aleatório;
e_i	Autovetores para matriz de covariâncias;
l_{ij}	Cargas fatoriais;

Σ_{pxp}	Matriz de covariância;
λ_i	Autovalores para matriz de covariâncias;
ϵ_p	Fatores específicos associados a cada variável;
$E(X)$	Vetor de esperança;

MEDIDAS DE PROXIMIDADE

d_{ij}	Medida de distância entre os indivíduos i e j;
s_{ij}	Coeficiente de concordância;
W	Matriz composta por todos os autovalores positivos;

REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

w_i	Conjunto de pesos;
x_i	Valor da variável;
tanh	Função tangente hiperbólica;
$E(t)$	Erro de classificação no treinamento;
n	Taxa de aprendizagem;
β	Constante da função sigmoide;

RANDOM FOREST

h_k	Classificador composto por uma coleção n de árvores tal que $k = 1, 2, \dots, n$;
T_k	Amostras aleatórias independentes;
m_{try}	Número de variáveis amostradas;
n_{tree}	Número de árvores;

NAIVE BAYES

$P_r(X)$	Probabilidade dos valores do preditor;
$P_r(X\|Y = C_l)$	Probabilidade condicional;
$P_r(Y)$	Probabilidade *a priori* do resultado;
$P_r(Y = C_l\|X)$	Probabilidade *a posteriori* da classe;

MÁQUINAS DE VETORES DE SUPORTE

$b/\|\|w\|\|$	Distância do hiperplano em relação à origem;
ξ_i	variáveis de folga ξ_i;
$K(x_i, x_j)$	Função Kernel;
X	Espaço de entradas;
$sgn(f(x))$	Função sinal;
w	Vetor de pesos ajustável;
Γ	Espaço de características;
$\Phi(x_i, x_j)$	Função para mapeamento do espaço de características;
δ, k	Constante da Função Kernel tangente hiperbólica;
δ, k, d	Constante da Função Kernel polinomial;
σ	Constante da Função Kernel radial;

TESTES ESTATÍSTICOS

P_e	Taxa hipotética de aceitação;
P_o	Taxa de aceitação relativa;
H	Estatística Hopkins;
$Kappa$	Índice Kappa;

SUMÁRIO

1. Introdução 1

2. Objetivos 4

2.1. Objetivo geral 4

2.2. Objetivos específicos 4

3. Justificativa e relevância 5

4. Revisão bibliográfica 7

4.1. Caracterização de maciços rochosos 7

4.1.1. Considerações iniciais 7

4.1.2. Resistência e alteração da rocha 7

4.1.3. Índice de qualidade da rocha 9

4.1.4. Espaçamento das descontinuidades 11

4.1.5. Condições das descontinuidades 11

4.2. Classificações de maciços rochosos 15

4.2.1. Considerações iniciais 15

4.2.2. Sistema de classificação RQD 17

4.2.3. RMR – Rock Mass Rating 17

4.3. Aprendizado de máquinas, conceitos e aplicações 26

4.3.1. Conceitos iniciais 26

4.3.2. Aplicações na área da engenharia de minas 28

4.4. Técnicas da estatística multivariada 30

4.4.1. Introdução a estatística multivariada 30

4.4.2. Análise fatorial 30

4.4.2.1. Considerações iniciais 30

4.4.2.2. Modelo fatorial ortogonal 31

4.4.2.3. Análises preliminares 33

4.4.2.4. Propriedades 34

4.4.2.5. Padronização das variáveis 36

4.4.2.6. Estimação do valor de m 36

4.4.2.7. Métodos de obtenção dos fatores 36

4.4.2.8. Rotação dos fatores 38

4.4.2.9. *Scores* fatoriais 39

4.4.3. Análise de agrupamentos 40

4.4.3.1. Considerações iniciais 40

4.4.3.2. Medidas de proximidade 42

4.4.3.3. K-means 45

4.4.3.4. *Partitioning Around Medoids* (PAM) 46

4.4.3.5. Escolha do número de grupos 48

4.5. Técnicas da inteligência artificial 48

4.5.1. Redes neurais artificiais 48

4.5.1.1. Considerações iniciais 48

4.5.1.2. Neurônios artificiais: Modelo MCP 50

4.5.1.3. Funções de ativação 51
4.5.1.4. Arquitetura das redes neurais artificiais 54
4.5.1.5. Atualização dos erros 56
4.5.1.6. Perceptron de múltiplas camadas - MLP 56
4.5.1.7. Treinamento de Redes MLP 57
4.5.2. Árvores de decisão 60
4.5.3. Random forest 63
4.5.4. Naive Bayes 66
4.5.5. Máquinas de vetores de suporte 68
4.5.5.1. Considerações iniciais 68
4.5.5.2. SVMs lineares 69
4.5.5.3. SVMs não lineares 75
4.6. Métricas para avaliação de modelos de classificação 79
4.6.1. Modelos por aprendizagem supervisionada 79
4.6.2. Modelos por aprendizagem não supervisionada 85
5. Metodologia 88
5.1. Considerações iniciais 88
5.2. Materiais 89
5.3. Pré-processamento e análises preliminares 90
5.4. Partição do banco de dados 93
5.5. Aplicação das técnicas 93

5.5.1. Identificação dos fatores comuns 94

5.5.2. Treinamento dos modelos de classificação 96

5.5.3. Validação dos modelos propostos 98

6. Resultados e discussões 100

6.1. Considerações iniciais 100

6.2. Pré-processamento e análises preliminares 100

6.2.1. Determinação da classificação RMR 100

6.2.2. Teste de esfericidade de Bartlett 102

6.3. Identificação dos fatores comuns 103

6.4. Modelos de classificação por aprendizagem supervisionada 107

6.4.1. Treinamento dos modelos 107

6.4.2. Validação dos modelos 110

6.4.3. Verificação do impacto no desempenho dos modelos com inserção das variáveis preenchimento e rugosidade das descontinuidades 114

6.5. Modelo de classificação por aprendizagem não supervisionada 115

6.5.1. Pré-análise e determinação do número de grupos 115

6.5.2. Análise e validação dos agrupamentos 118

6.5.3. Visualização dos agrupamentos 119

6.5.4. Interpretação dos agrupamentos 120

6.5.5. Criação da variável pontuação para hierarquização dos agrupamentos 122

6.5.6. Relação da variável pontuação com o valor do RMR 127

6.5.7. Aplicação de árvores de decisão para os grupos formados 128

7. Conclusões 130

Referências bibliográficas 134

Apêndice A – Estatística básica do banco de dados 145

Apêndice B – Estatística geral para das variáveis para os grupos formados pelo método não-supervisionado 151

Apêndice C – Script para Naive Bayes 169

Apêndice D – Script para Random Forest 173

Apêndice E – Script para Support Vector Machine 178

Apêndice F – Script para Redes Neurais Artificiais 182

Apêndice G – Script para Partitioning Around Medoids 191

Apêndice H – Script para Análise Fatorial 193

1. Introdução

Os sistemas de classificação de maciços rochosos surgiram da necessidade de dimensionamento de suportes em obras com escavações subterrâneas, desde então, outros sistemas vêm sendo propostos com diversos objetivos. Os sistemas clássicos de classificação são o RMR, *Rock Mass Rating* proposto por BIENIAWSKI (1973, 1989), o sistema Q, *Rock Mass Quality* (Q) proposto por BARTON *et al.* (1974), e o GSI, *Geological Strength Index* proposto por HOEK (1994) e HOEK *et al.* (1995), amplamente aceitos na literatura e aplicados em minerações a céu aberto e subterrânea.

Com relação a obras na engenharia de minas, têm-se na lavra a céu aberto a tecnologia mais importante para extração de recursos minerais da crosta terrestre (ZARE NAGHADEHI *et al.*, 2013). Posto isso, muitos dos sistemas clássicos de classificação são frequentemente adaptados para o ambiente da lavra a céu aberto, tais como o *Rock Mass Strength* (RMS), proposto por STILLE *et al.* (1982), e o *Slope Mass Rating* (SMR), proposto por ROMANA (1993), todos com objetivo de melhor adequabilidade. A avaliação da condição dos maciços rochosos, por meio da quantificação de sua qualidade, constitui fase preliminar aos estudos de análise de estabilidade, permitindo as estimativas dos parâmetros de resistência dos maciços rochosos e descontinuidades, parâmetros de entrada utilizados nos modelos numéricos.

A maioria dos sistemas de classificação foi proposta para ambientes geológicos extremamente divergentes da realidade brasileira. Com isto, muito dos parâmetros utilizados nos sistemas clássicos de classificação não se adequam a realidade dos maciços rochosos brasileiros. Alguns parâmetros se mantêm inalterados e estes são frequentemente quantitativos, tais como resistência da rocha intacta, espaçamento e persistência das descontinuidades. Em parâmetros qualitativos a subjetividade é inerente a todos os sistemas de classificação.

As limitações dos sistemas de classificação são destacadas por diversos autores, com destaque a PELLS & BERTUZZI (2007), POTVIN *et al*. (2012) e ULUSAY *et al*. (1992). PELLS & BERTUZZI (2007), POTVIN *et al*. (2012) que apontam como fatores limitadores a incerteza na estimativa de parâmetros e julgamentos subjetivos. ULUSAY *et al*. (1992) destacam limitações no contexto de rochas brandas e rochas altamente alteradas, relatando que o RMR pode gerar resultados errôneos quando aplicado em rochas brandas, estratificadas e argilosas. Neste contexto, parâmetros como alteração dos maciços rochosos, são subestimados, com um peso pequeno, quando comparado aos demais parâmetros. Posto isso, muitos autores

vêm propondo correções no sistema de pesos do RMR, como SANTOS *et al*. (2012), com foco na alteração dos maciços rochosos.

Assim, a presente pesquisa tem como objetivo a proposição de diferentes modelos de classificação para maciços rochosos brasileiros. Portanto, o banco de dados utilizado nesta pesquisa é proveniente de minas a céu-aberto brasileiras. O banco de dados é extenso, com cerca de 3200 pontos, com informações de variáveis relativas aos parâmetros que compõem o RMR.

A proposição do sistema foi feita com base na seleção dos parâmetros que mais influenciam a qualidade do maciço rochoso, a partir da determinação de fatores comuns utilizando a análise fatorial. Os sistemas de classificação foram desenvolvidos a partir das variáveis relativas aos fatores extraídos do banco de dados. Com isso, a redução da dimensionalidade do banco de dados foi obtida. Neste contexto, a redução da dimensionalidade dos bancos de dados geotécnicos é de grande interesse já que os levantamentos são trabalhosos e devem ser feitos ao longo de toda a vida útil da mina.

A criação dos modelos de classificação foi feita por diferentes formas de aprendizado, a aprendizagem supervisionada e a aprendizagem não-supervisionada. Na aprendizagem supervisionada os modelos funcionam de forma preditiva e assim as classes do RMR foram utilizadas, já no modelo por aprendizagem não supervisionada o modelo é descritivo e então busca-se a interpretação das classes construídas. Embora nos modelos por aprendizagem supervisionada as classes do RMR tenham sido utilizadas, o sistema de classificação é de fato diferente do RMR, porque é utilizado um número menor de variáveis, com um sistema de pesos diferente.

As técnicas utilizadas para os modelos por aprendizagem supervisionada foram o *Naïve Bayes*, *Random Forest*, *Redes Neurais Artificiais* e as *Máquinas de Vetores de Suporte*. Embora as técnicas utilizadas tenham o mesmo objetivo de criar modelos de classificação, a concepção dos métodos é distinta. O classificador naïve Bayes é baseado na teoria da probabilidade, o random forest é um método baseado em árvores de decisão, as redes neurais artificiais são sistemas com estrutura baseada nas redes neurológicas e as máquinas de vetores de suporte são sistemas baseados na teoria de aprendizado estatístico.

Para a criação do modelo por aprendizagem não supervisionada foi utilizado o algoritmo *Partitioning Around Medoids* (PAM), que é uma técnica da estatística multivariada semelhante

ao método de análise de agrupamentos K-means. A técnica otimiza a formação dos *clusters* buscando a dissimilaridade mínima com base nos medóides.

Atualmente, o uso de estatística multivariada e técnicas baseadas em inteligência artificial tem recebido considerável atenção em estudos relacionados às propriedades geomecânicas, mecânica das rochas e estabilidade de taludes. Em relação ao problema de obtenção de parâmetros geomecânicos e determinação da classificação do maciço rochoso, destacam-se os estudos realizados por MEULENKAMP & GRIMA (1999), SINGH *et al*. (2001), GOKCEOGLU *et al*. (2004), LIU & CHEN (2006), PANTELIDIS (2009), MONJEZI *el al*. (2010), ZARE NAGHADEHI *et al*. (2011), NEJATI *et al*. (2014), PINHEIRO *et al*. (2015) e BARHAM *et al*. (2020), usando diferentes técnicas. Em relação à análise de estabilidade de encostas por meio de técnicas de inteligência artificial, destacam-se os estudos de SAKELLARIOU & FERENTINOU (2005), ZARE NAGHADEHI *et al*. (2013), MELCHIORRE *et al*. (2011), SAMUI & KOTHARI (2011), LI *et al*. (2015) e AHOUR *et al*. (2020).

2. Objetivos

2.1. Objetivo geral

O objetivo da pesquisa é a proposição de modelos de classificação para maciços rochosos brasileiros. A construção do modelo baseia-se nas variáveis presentes no sistema de classificação RMR. Assim, os modelos propostos foram construídos a partir de técnicas quantitativas, como a estatística multivariada e técnicas da inteligência artificial. Os modelos quantitativos reduzem significativamente a subjetividade que esses sistemas possam oferecer.

2.2. Objetivos específicos

Para se atingir o objetivo geral, a presente pesquisa se orientou a partir dos objetivos específicos, que estão listados a seguir:

- Construção e organização do banco de dados;
- Estudo prévio das variáveis do banco de dados;
- Aplicação do sistema de classificação RMR;
- Determinação dos fatores comuns influenciadores da qualidade do maciço rochoso;
- Ajuste dos modelos de classificação via aprendizagem supervisionada;
- Ajuste dos modelos de classificação via aprendizagem não supervisionada.

3. Justificativa e relevância

A ciência de dados vive um amplo crescimento desde as últimas décadas. Atualmente verifica-se uma popularização das técnicas de aprendizado de máquinas em geral, que é reflexo do poder destas técnicas para resolução de diversos problemas. Além disso, deve-se ressaltar o crescente acesso da comunidade científica a recursos tecnológicos, com hardwares cada vez mais potentes e disponíveis no mercado. Este processo fica claro com a popularização de repositórios, como por exemplo, o GitHub, que permite a disponibilização de materiais teóricos e práticos (algoritmos e scripts) em diversas linguagens de programação para toda a comunidade.

Qualquer método proposto é restrito às condições tecnológicas da época corrente, e isto não é diferente em relação aos sistemas de classificação de maciços rochosos. Os "clássicos" sistemas de classificação estão sujeitos às condições tecnológicas da época em que foram propostos, o que ocasiona limitações nos métodos. Posto isso, fica claro que estes sistemas podem e devem ser aperfeiçoados no decorrer do tempo. Este aperfeiçoamento está diretamente relacionado ao desenvolvimento da ciência de dados, que otimiza a aquisição e processamento de dados.

As limitações dos sistemas de classificação já vêm sendo discutidas por diferentes autores, tais como PELLS & BERTUZZI (2007), POTVIN *et al*. (2012), ULUSAY *et al*. (1992), entre outros. Incertezas na estimativa e julgamentos subjetivos em parâmetros geomecânicos, além de limitações relacionadas à aplicação destes sistemas em rochas brandas são pontos de partida destas discussões.

A presente pesquisa apresenta uma nova abordagem para o desenvolvimento de classificações geomecânicas. A proposição dos modelos de classificação parte de métodos quantitativos com o objetivo de redução das limitações destacadas, ou seja, subjetividade de parâmetros, incertezas nas estimativas, abrangendo diferentes qualidades de maciços rochosos. Os métodos aplicados nesta pesquisa são da estatística multivariada e inteligência artificial e o banco de dados em estudo proveniente de minas a céu aberto, localizados no Brasil.

A metodologia utilizada é original e permite seu aperfeiçoamento futuro, considerando que foi desenvolvida em software de domínio livre que permite a utilização da comunidade técnica, podendo haver a incorporação de mais dados e otimização do aprendizado dos modelos. O banco de dados é extenso, com variabilidade significativa, abrangendo rochas de diferentes

qualidades. Todas as classes do RMR estão representadas, logo, acredita-se na representatividade dos diferentes tipos de rochas.

4. Revisão bibliográfica

4.1. Caracterização de maciços rochosos

4.1.1. Considerações iniciais

A caracterização dos maciços rochosos é realizada por meio do levantamento das características do maciço rochoso, ou seja, rocha intacta e descontinuidades presentes. As características são obtidas por meio de ensaios e observações em campo, abrangendo naturezas quantitativas e qualitativas a depender dos tipos de parâmetros em análise. A Figura 4.1 apresenta alguns dos principais parâmetros relativos às descontinuidades.

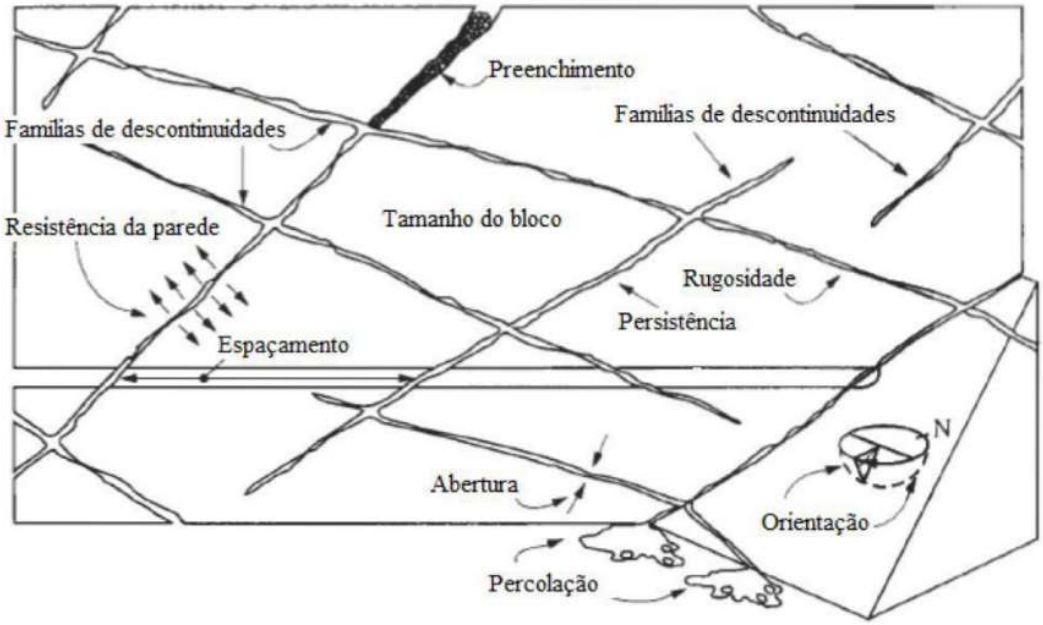


Figura 4.1 - Características das descontinuidades. Adaptado de ISRM (1981).

Além dos parâmetros apresentados na Figura 4.1, destacam-se a alteração e a resistência da rocha. Ambos os parâmetros podem ser levantados em campo; a alteração por meio de observação do material rochoso e a resistência por meio de ensaios de compressão uniaxial e triaxial, ou em campo por meio do teste de martelo de geólogo ou pelo teste do esclerômetro de Schmidt.

4.1.2. Resistência e alteração da rocha

A resistência à compressão da rocha intacta usualmente é determinada por meio de ensaios de compressão, tais como os ensaios de compressão uniaxial e triaxial, em que as

amostras de testemunhos de sondagem são submetidas a cargas axiais ou triaxiais em prensas até o seu colapso. O maior desafio da obtenção deste parâmetro é a coleta e manutenção das amostras.

Na impossibilidade de aplicação destes ensaios diversas outras formas de obtenção da resistência foram propostas, destacando o teste do martelo de geólogo e testes por meio do esclerômetro de Schmidt. Para estes tipos de testes existem correlações propostas na literatura para estimação da resistência à compressão uniaxial.

O teste do martelo de geólogo sempre foi bastante utilizado pela simplicidade de aplicação, além dos resultados imediatos e coerentes com a realidade. Neste tipo de teste o resultado da resistência é obtido em faixas e relacionado com a característica do material em resposta à aplicação de golpes do martelo de geólogo. A Tabela 4.1 apresenta as faixas da resistência dos maciços rochosos em relação à descrição e característica do material.

Tabela 4.1 - Resistência dos maciços rochosos por meio do teste de martelo de geólogo. Adaptado da ISRM (1981).

Grau	Resistência (MPa)	Descrição	Característica
R0	0,25 – 1,00	Extremamente branda	Marcada pela unha
R1	1,00 – 5,00	Muito branda	Esmigalha-se com um golpe de martelo. Raspada com canivete.
R2	5,00 – 25,0	Branda	Marcada com a ponta do martelo em golpe firme. Raspada com dificuldade com o canivete.
R3	25,0 – 50,0	Resistência média	Amostras fraturadas com único golpe de martelo. Não risca com canivete.
R4	50,0 – 100	Resistente	Mais de um golpe de martelo para fraturar a rocha.
R5	100 – 250	Muito resistente	Muitos golpes de martelo para fraturar a rocha.
R6	> 250	Extremamente resistente	Amostras somente lascadas com golpes de martelo.

A alteração da rocha reflete o conjunto de ações intempéricas sofrida pelo maciço rochoso. De fato, em uma análise qualitativa do estado de alteração, deve-se atentar a fatores como mineralogia e a textura da rocha. A Tabela 4.2 apresenta uma forma de caracterizar a alteração em maciços rochosos segundo a ISRM (1981).

Tabela 4.2 - Caracterização da alteração em maciços rochosos. Adaptado da ISRM (1981).

Sigla	Denominação	Descrição
W1	Sem alteração (rocha sã)	Alteração mineralógica nula ou incipiente. Minerais preservam brilho original, cor e clivagem. Foliação visível e selada. Resistência original da rocha não afetada pela alteração.
W2	Pouca alteração	Leve descoloração e oxidação na matriz e ao longo das descontinuidades. Foliação visível e selada. Juntas fechadas, paredes ligeiramente alteradas. Resistência original da rocha parcialmente afetada.
W3	Alteração moderada	Matriz descolorida, com evidências de oxidação. Juntas abertas (< 1.0 mm) e oxidadas, podendo ocorrer material mais alterado ao longo das descontinuidades. Foliação realçada pelo intemperismo. Resistência afetada.
W4	Muita alteração	Alteração acentuada, alguns minerais parcialmente decompostos. Matriz totalmente oxidada e cores muito modificadas. Fraturas abertas (2 < e < 5 mm) e oxidadas. Foliação realçada pelo intemperismo. Desplacamentos ao longo da foliação.
W5	Alteração extrema	Material completamente alterado para solo estruturado. Extremamente descolorido, minerais resistentes quebrados e outros transformados em argilominerais. Foliação preservada. Juntas não discerníveis.
W6	Solo residual	Material totalmente transformado em solo.

4.1.3. Índice de qualidade da rocha

O índice de qualidade da rocha, *Rock Quality Designation* ou RQD, é tradicionalmente obtido a partir de testemunhos de sondagens. Para determinação do índice deve-se calcular a porcentagem de pedaços intactos com mais de 100 mm no comprimento total da amostragem, sendo que os furos devem ter no mínimo 54,7 mm de diâmetro. Além disso, os furos devem ser perfurados com amostrador duplo. A Figura 4.2 apresenta o processo de cálculo do RQD por meio de um testemunho de sondagem.

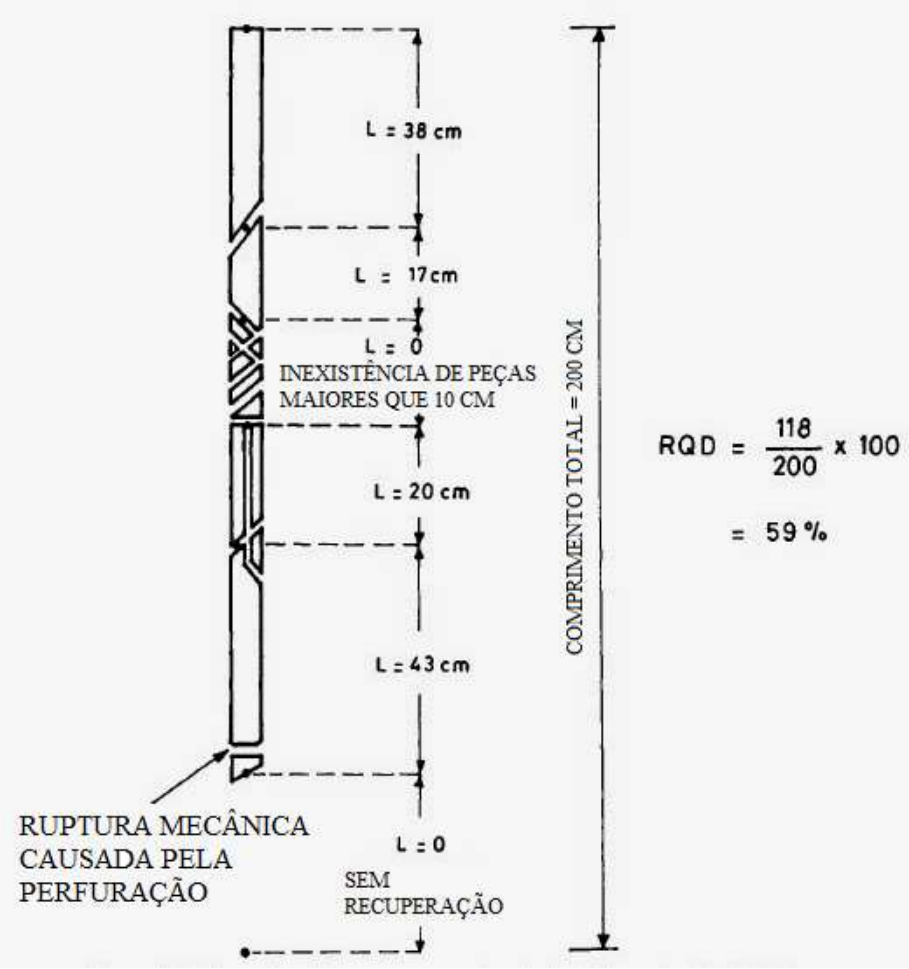


Figura 4.2 - Determinação do RQD por meio de um testemunho de sondagem. Modificado de DEERE & DEERE (1988).

Na ausência de testemunhos o RQD pode ser obtido por meio das equações propostas por HUDSON & HARRISON (1997) e PALMSTRÖM (1982), que estabelecem correlação entre a frequência das descontinuidades e o RQD. As Equações 4.1 e 4.2 permitem a obtenção do RQD, onde λ é a frequência das descontinuidades (número de descontinuidades por metro na *scanline*) e t é o corte (tamanho do pedaço de rocha intacta considerada, normalmente 10 centímetros), e Jv é o contador volumétrico de juntas.

$$RQD = 100(\lambda t + 1)e^{-\lambda t} \qquad (4.1)$$

$$RQD = 115 - 3{,}3Jv \qquad (4.2)$$

O contador volumétrico de juntas é uma medida para o número de juntas dentro de uma unidade de volume do maciço rochoso, definido pela Equação 4.3, onde S_i é o espaçamento das juntas em metros para a referida família de juntas.

$$Jv = \sum 1/s_i \qquad (4.3)$$

4.1.4. Espaçamento das descontinuidades

O espaçamento das descontinuidades pode ser tomado como a distância média entre duas descontinuidades da mesma família. Em geral as distâncias seguem um padrão e o valor médio deve ser adotado. Uma vez que os valores se tornem discrepantes, influenciando a média, a setorização do maciço rochoso é recomendada.

Existem duas maneiras de se medir o espaçamento entre as descontinuidades, tomando-se a distância perpendicular entre duas descontinuidades da mesma família e a demonstrada na Figura 4.1, apresentada na seção 4.1.1. Na forma demonstrada na Figura 4.1 têm-se a medida entre duas descontinuidades adjacentes, independentemente da família, assim, a distância não é tomada na perpendicular e o inverso dessa distância representa a frequência de descontinuidade.

As duas formas de medida de espaçamento são utilizadas para determinar o RQD. Quando a medida do espaçamento é tomada perpendicularmente entre duas descontinuidades da mesma família, utiliza-se a equação de Palmström (Equação 4.1). Quando a medida do espaçamento é obtida como mostrada na Figura 4.1, resultando na frequência de descontinuidades o RQD é obtido por meio da Equação 4.4, proposta por PRIEST & HUDSON (1976), onde λ representa a frequência das descontinuidades.

$$RQD = 100e^{-0,1\lambda t}(0,1\lambda + 1) \qquad (4.4)$$

4.1.5. Condições das descontinuidades

As descontinuidades constituem os planos de fraqueza da rocha, formando os limites da rocha intacta. As propriedades das descontinuidades são importantes para classificação de maciços rochosos, estando presente nos sistemas de classificação. As descontinuidades podem ser de diversos tipos, como juntas, falhas, planos de acamamento, planos de foliação. Os

parâmetros que abrangem as condições das descontinuidades são a alteração, persistência, abertura, preenchimento e rugosidade.

Outro tipo de alteração presente no maciço rochoso é a alteração das paredes da descontinuidade, que pode ser caracterizada de acordo com as recomendações da ISRM (1981) que estão apresentadas na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 - Caracterização das alterações da parede das descontinuidades de acordo com a ISRM (1981).

Grau de alteração do Maciço	Descrição
Não intemperizada/sã	Sem sinais visíveis de desgaste; rocha sã; cristais brilhantes
Ligeiramente intemperizada	As descontinuidades são manchadas ou descoloridas e podem conter preenchimento de material fino alterado. A descoloração pode se estender das superfícies de descontinuidades da rocha a uma distância de até 20% do espaçamento das descontinuidades.
Moderadamente intemperizada	Leve descoloração estende-se desde os planos de descontinuidades à uma distância maior que 20% do espaçamento das descontinuidades. As descontinuidades podem conter preenchimento de material alterado. Abertura parcial dos limites de grãos pode ser observada.
Altamente intemperizada	A descoloração se estende por toda a rocha, e o material da rocha é em parte friável. A textura original da rocha se mantém preservada, mas ocorre a separação dos grãos.
Completamente alterada	A rocha é totalmente descolorida e decomposta, com uma estrutura friável. A aparência externa é a de um solo.

O parâmetro de persistência é obtido a partir do comprimento médio das descontinuidades. Assim, a persistência reflete a magnitude das descontinuidades no maciço rochoso.

A abertura é a medida da distância entre as paredes de uma descontinuidade, controlando diversos fatores tais como a presença de preenchimento, interconexão entre as superfícies, além da quantidade de água que pode fluir através da descontinuidade.

A rugosidade constitui um parâmetro na caracterização das condições das descontinuidades, refletindo o grau de aspereza da parede da descontinuidade. A rugosidade influencia diretamente a estabilidade em maciços rochosos, considerando as superfícies limpas e fechadas, a rugosidade inibe o movimento de cisalhamento ao longo da superfície das juntas. BARTON & CHOUBEY (1977) propõem um perfil para determinação do coeficiente de rugosidade de descontinuidades (JRC), ver Figura 4.3.

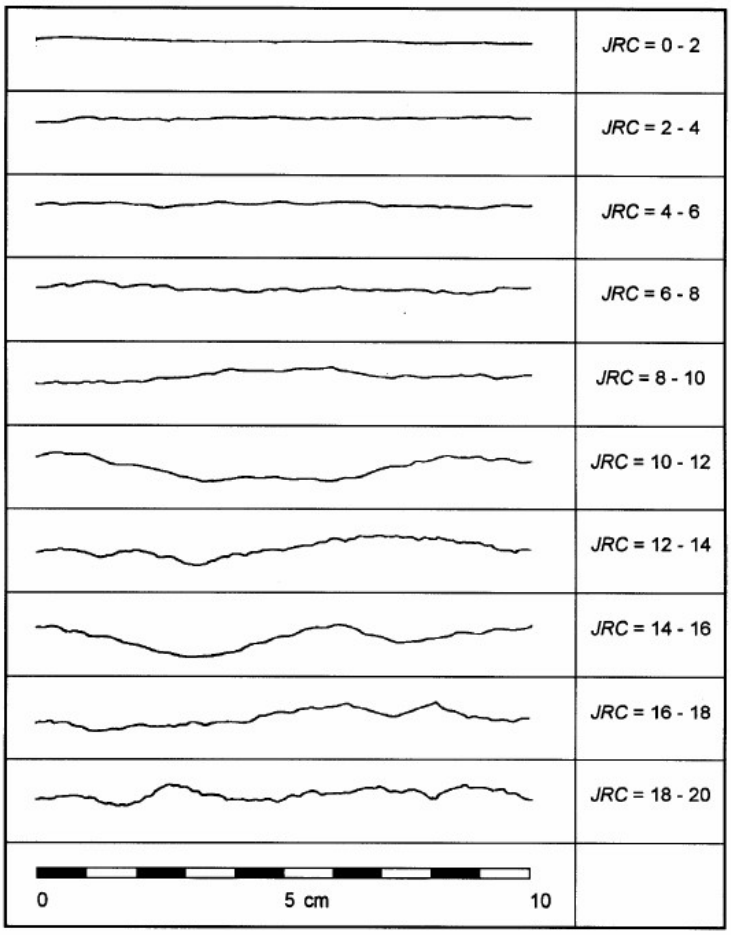


Figura 4.3 – *Relação entre o p*erfil de *r*ugosidade e JRC. Modificado de BARTON & CHOUBEY (1977).

O preenchimento constitui o material que preenche as aberturas entre as descontinuidades. Podendo ser proveniente da alteração das paredes da rocha ou de fluidos de percolação. Assim, o preenchimento está diretamente relacionado com a abertura das descontinuidades. De acordo com ÁVILA (2012), com a diminuição da abertura, as asperezas da superfície da rocha tendem a ficar mais interconectadas, dependendo de sua espessura; e ambos, preenchimento e a rocha contribuem para a resistência ao cisalhamento da descontinuidade. A resistência ao cisalhamento ao longo de uma descontinuidade é, portanto, dependente da distância de sua abertura, da presença ou ausência de preenchimento, da rugosidade das superfícies, e da natureza do material de preenchimento.

4.2. Classificações de maciços rochosos

4.2.1. Considerações iniciais

Os sistemas de classificação de maciços rochosos surgiram primeiramente como ferramenta na seleção de suporte no âmbito da estabilidade de escavações subterrâneas rochosas. Em engenharia de rochas, o primeiro maior sistema de classificação foi proposto para aberturas de túneis (TERZAGHI, 1946). Desde então, diferentes tipos de classificações vêm sendo propostas com diferentes tipos de aplicações, abrangendo tanto a engenharia civil como a engenharia de minas.

HOEK *et al.* (1995) salientam a importância do uso de um sistema de classificação de maciços rochosos independente da utilização dos métodos analíticos em projetos de engenharia. Posto isso, BIENIAWSKI (1989) recomenda a aplicação destes sistemas de forma inteligente em conjunto com demais técnicas e métodos analíticos e de observação para atingir os objetivos do projeto em aplicação. Assim, BIENIAWSKI (1989) conclui que os sistemas de classificação podem servir como um apoio para projetos de engenharia.

Segundo PALMSTRÖM (2009), Barton e Bieniawski apontaram que os sistemas de classificação de maciços rochosos desempenham um papel cada vez mais importante em projetos de engenharia. Os principais sistemas de classificação para rochas, sistema Q e o RMR, usam parâmetros que caracterizam o maciço rochoso, relacionados a rocha e descontinuidades, como entrada de dados. Cada um destes parâmetros é classificado e cada classe retorna valores ou pesos para expressar a qualidade da rocha.

BIENIAWSKI (1989) destaca os seis principais objetivos das classificações de maciços rochosos, sendo eles o de identificar os parâmetros mais influentes no comportamento de um maciço rochoso; discriminar diferentes formações do maciço rochoso em particular, por grupos com comportamento semelhante; fornecer uma base para compreender as características de cada classe de maciço rochoso; relacionar a experiência das condições da rocha em um local com as condições e experiência encontrados em outros locais; prover dados quantitativos e diretrizes para projetos de engenharia; fornecer uma base comum para a comunicação entre engenheiros e geólogos.

Posto isso, as classificações de maciços rochosos vêm sendo aplicadas em diferentes obras de engenharia com diferentes objetivos. A Tabela 4.4 apresenta os principais sistemas de classificação com seus respectivos nomes, autores e data, país de origem e aplicações.

Tabela 4.4 - Principais sistemas de classificações de maciço rochosos. (Modificado de BIENIAWSKI, 1989).

Nome da classificação	Autor e data	País de origem	Aplicações
Rock load	TERZAGHI (1946)	USA	Túneis
Stand-up time	LAUFFER (1958)	Austrália	Túneis
Rock quality designation	DEERE *et al.* (1967)	USA	Furos de sondagem, Túneis
RSR *concept*	WICKHAM *et al.* (1972)	USA	Túneis
RMR system	BIENIAWSKI (1973)	África do Sul	Geral
NATM	PACHER *et al.* (1974)	Áustria	Túneis
Q-system	BARTON et al. (1974)	Noruega	Geral
Strength-size	FRANKLIN (1976)	Canadá	Túneis
Basic geotechnical description	ISRM (1981)	Internacional	Geral
RMS	STILLE *et al.* (1982)	Suécia	Mineração de metais
Unified classification	WILLIAMSON (1984)	USA	Geral
WCS	SINGH (1986)	Índia	Mineração de carvão
M - RMR	ÜNAL & ÖZKAN (1990) – ÜNAL (1996)	Turquia	Mineração
BQ (*Basic Quality Rock Mass*)	Diversos autores (1994)	China	Geral
RMi	PALMSTRÖM (1996, 1995)	Suécia	Túneis
GSI	HOEK & BROWN (1997)	Canadá	Geral

Em relação aos sistemas de classificação apresentados destaca-se o RSR, *Rock Structure Rating*, desenvolvido por WICKHAM *et al*. (1972), com aplicações em túneis. Este sistema destaca-se por se tratar do primeiro sistema de atribuição de pesos em relação à importância dos parâmetros. O sistema RSR, utiliza os parâmetros relacionados à avaliação geral da estrutura rochosa, efeito do padrão de descontinuidades em relação a direção do túnel e efeitos do fluxo de água subterrânea.

Em relação a facilidade de aplicação e aceitação na literatura destacam-se os sistemas RMR, *Rock Mass Rating*, proposto por BIENIAWSKI (1973, 1989) o Sistema Q, proposto por BARTON *et al.* (1974), o GSI, *Geological Strength Index*, proposto por HOEK & BROWN (1997) e o RMi, *Rock Mass Index*, proposto por PALMSTRÖM (1996). Várias modificações e ajustes foram propostos para o RMR objetivando aplicações na mineração, tais como os trabalhos de LAUBSCHER (1977), LAUBSCHER & TAYLOR (1976) e LAUBSCHER & PAGE (1990) resultando no MRMR, *Modified Rock Mass Rating*, além do MBR, Modified basic RMR proposto por KENDORSKI *et al.* (1993).

4.2.2. Sistema de classificação RQD

O RQD, *Rock Quality Designation*, descrito no texto anteriormente, pode ser utilizado também como um sistema de classificação de acordo com DEERE *et al.* (1967). A Tabela 4.5 apresenta a qualidade da rocha em função dos valores do RQD, de acordo com DEERE *et al.* (1967).

Tabela 4.5 - Relação entre o RQD e a qualidade da rocha (DEERE *et al.,* 1967).

RQD (%)	Qualidade da rocha
<25	A – Muito ruim
25 – 50	B – Ruim
50 – 75	C – Razoável
75 – 90	D – Bom
90 – 100	E – Excelente

4.2.3. RMR – Rock Mass Rating

O RMR, *Rock Mass Rating*, foi desenvolvido por BIENIAWSKI entre os anos de 1972 e 1973 (BIENIAWSKI, 1989). A ampla aceitação do RMR impulsionou a diversas modificações no sistema de classificação visando novas aplicações. BIENIAWSKI (1989) alerta que o sistema RMR seja usado para a finalidade na qual ele foi desenvolvido e não como resposta para todos os problemas de projeto.

O RMR utiliza seis parâmetros para classificação do maciço rochoso, sendo eles a Resistência à Compressão Uniaxial da rocha, o RQD (*Rock Quality Design*), o espaçamento entre as descontinuidades, a condição das descontinuidades, as condições de água subterrânea e a orientação das descontinuidades em relação a escavação. A cada parâmetro é atribuído um

peso. O somatório dos cinco primeiros parâmetros resulta no RMR básico, não ajustado de acordo com as orientações das descontinuidades. Em classificações cujo objetivo é determinação de parâmetros de resistência da rocha o RMR básico é utilizado na condição seca. Todos os parâmetros necessários para obtenção do RMR podem ser obtidos por meio de levantamentos geotécnicos.

A Tabela 4.6 apresenta discriminadamente o sistema de pesos referentes aos cinco primeiros parâmetros para determinação do RMR básico. Assim, têm-se o P1 como peso relacionado a resistência da rocha intacta, o P2 como peso do RQD, o P3 como peso do espaçamento das descontinuidades, o P4 como peso das condições das descontinuidades e o P5 como peso das condições de água subterrânea.

Tabela 4.6 - O Rock Mass Rating de acordo com BIENIAWSKI (1989).

Parâmetros			Valores						
1	Resistência da rocha intacta	Compressão puntiforme	> 10 MPa	4-10 MPa	2-4 MPa	1-2 MPa	Ver compressão uniaxial		
		Compressão uniaxial	> 250 MPa	100-250 MPa	50-100 MPa	25-50 MPa	5 - 25 MPa	1 - 5 MPa	<1 MPa
	Pesos (P1)		15	12	7	4	2	1	0
2	RQD		90-100%	75-90%	50-75%	25-50%	<25%		
	Pesos (P2)		20	17	13	8	3		
3	Espaçamento das descontinuidades		>2m	0,6-2m	200-600mm	60-200mm	<60mm		
	Pesos (P3)		20	15	10	8	5		
4	Condição das descontinuidades		Superfícies muito rugosas, sem abertura, paredes de rocha não alteradas	Superfícies ligeiramente rugosas, abertura <1mm paredes ligeiramente alteradas	Superfícies ligeiramente rugosas, abertura <1mm, paredes muito alteradas	Superfície polidas ou preenchimento com espessura <5mm ou juntas contínuas com abertura 1-5mm	Preenchimento mole com espessura >5mm ou juntas contínuas com abertura >5mm		
	Pesos (P4)		30	25	20	10	0		
5	Presença de água	Influxo por 10m no comprimento do túnel (1/m)	Nenhum	< 10 L/min	10-25 L/min	25-125 L/min	> 125 L/min		
		pressão de água na junta/σ principal maior	0	<0,1	0,1-0,2	0,2-0,5	> 0,5		

		(relação)					
		Condições gerais	Completamente seco	Água intersticial	Úmido	Gotejamento	Fluxo
	Pesos (P5)		15	10	7	4	0

Para uma análise mais profunda em relação ao parâmetro condições das descontinuidades a Tabela 4.7 deve ser utilizada. Na Tabela 4.7 as características das descontinuidades são tratadas separadamente, e o somatório dos pesos individuais substituem o parâmetro 4 da Tabela 4.6.

Tabela 4.7 - Determinação do peso do parâmetro condições das descontinuidades, de acordo com BIENIAWSKI (1989).

Parâmetro	Valor				
Persistência	1m	1m-3m	3m-10m	10m-20m	>20m
	6	4	2	1	0
Abertura	nenhuma	<0,1mm	0,1mm– 1,0mm	1mm – 5mm	>5mm
	6	5	4	1	0
Rugosidade	Muito rugosa	rugosa	Ligeiramente rugosa	Lisa	Estriada
	6	5	3	1	0
Preenchimento		Preenchimento duro		Preenchimento macio	
	Nenhum	<5mm	>5mm	<5mm	>5mm
	6	4	2	2	0
Alteração	Não alterada	Ligeiramente alterada	Moderadamente alterada	Muito alterada	Decomposta
	6	5	3	1	0
Valor (P4)	Somatório das pontuações				

Para a obtenção do RMR global é necessário incluir o sexto parâmetro no RMR básico, relativo à orientação das descontinuidades. Importante salientar que a influência das orientações das descontinuidades depende das aplicações do projeto em análise, tais como taludes urbanos,

mineração, escavações subterrâneas e fundações. Assim, têm-se a relatividade do sexto parâmetro. A Tabela 4.8 apresenta as características para determinação das classes de orientação. A Tabela 4.9 apresenta o peso relativo ao sexto parâmetro.

Tabela 4.8 - Classes de orientação das descontinuidades em escavações de túneis. (Modificado de BIENIAWSKI, 1989).

Direção perpendicular ao eixo do túnel			
Na direção do mergulho		Contra o mergulho	
45 – 90°	20 – 45°	45 – 90°	20 – 45°
Muito favorável	Favorável	Razoável	Desfavorável
Direção paralela ao eixo do túnel		Independentemente da direção (strike)	
20 – 45°	45 – 90°	0 – 20°	
Razoável	Muito desfavorável	Razoável	

Tabela 4.9 - Pesos para correção do RMR básico. (Modificado de BIENIAWSKI, 1989).

Orientações da direção e mergulho		Muito favorável	Favorável	Razoável	Desfavorável	Muito desfavorável
Valor	Túneis e Minas	0	-2	-5	-10	-12
	Fundações	0	-2	-7	-15	-25
	Taludes	0	-5	-25	-50	

A classificação do maciço rochoso pelo RMR de acordo com BIENIAWSKI (1989) está apresentada na Tabela 4.10. Neste sistema de classificação o maciço rochoso é divido em cinco classes, maciço muito bom, bom, razoável, pobre e muito pobre.

Tabela 4.10 - Classificação do maciço rochoso pelo RMR de acordo com BIENIAWSKI (1989).

Classificação do maciço rochoso de acordo com o RMR					
Valor	100-81	80-61	60-41	40-21	< 21
Classe	I	II	III	IV	V
Descrição da rocha	Muito boa	Boa	Razoável	Pobre	Muito pobre

BIENIAWSKI (1989) apresenta ábacos para determinação dos pesos de forma mais precisa, para os parâmetros de resistência à compressão uniaxial, RQD e espaçamento das descontinuidades. As Figuras 4.4, 4.5 e 4.6 apresentam os gráficos para obtenção dos pesos para os parâmetros resistência à compressão uniaxial (Figura 4.4), RQD (Figura 4.5) e espaçamento entre as descontinuidades (Figura 4.6). Em situações de ausência de dados de sondagens para o RQD ou espaçamento entre as descontinuidades a Figura 4.7 pode ser utilizada, onde os parâmetros são obtidos com base nos dados de correlação de PRIEST & HUDSON (1976).

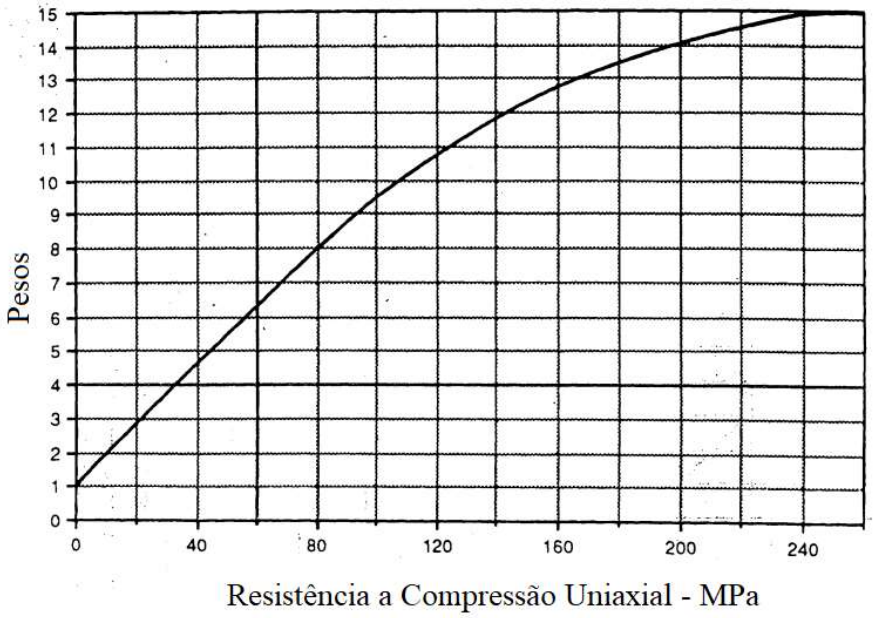


Figura 4.4 - Gráfico para determinação dos pesos em relação a Resistência à Compressão Uniaxial. Modificado de BIENIAWSKI (1989).

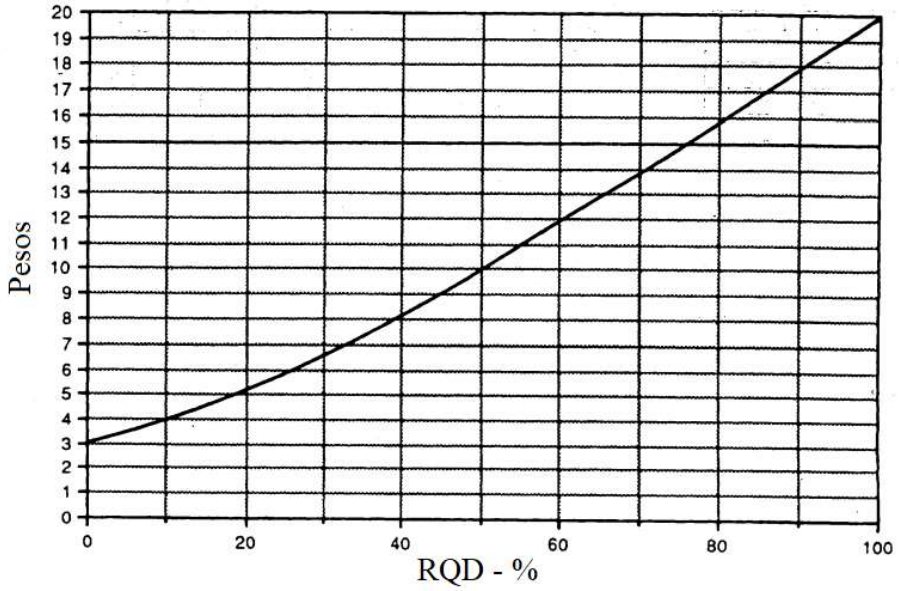


Figura 4.5 - Gráfico para determinação dos pesos em relação ao RQD. Modificado de BIENIAWSKI (1989).

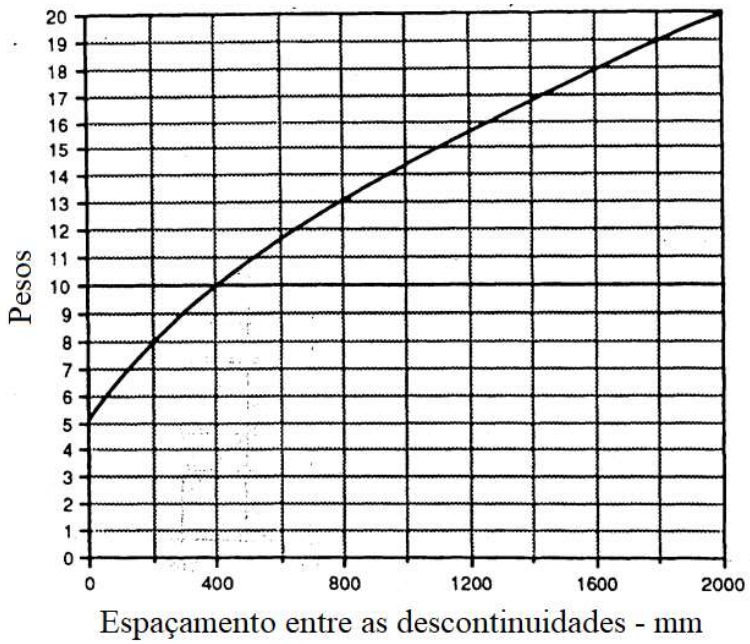


Figura 4.6 - Gráfico para determinação dos pesos em relação ao Espaçamento entre as descontinuidades. Modificado de BIENIAWSKI (1989).

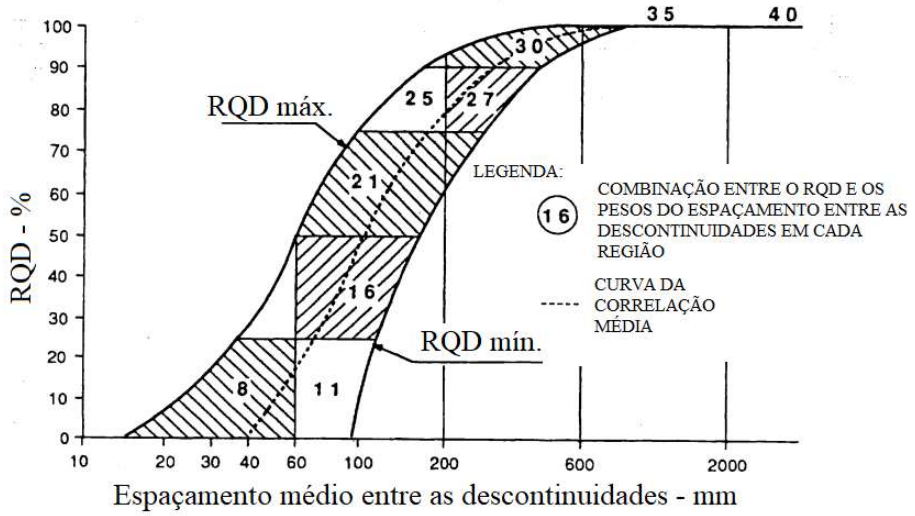


Figura 4.7 - Gráfico de relação entre o espaçamento das descontinuidades e o RQD. Modificado de BIENIAWSKI (1989).

O RMR pode ser aplicado para determinação de propriedades mecânicas de maciços rochosos, auxiliando em projetos de estabilidade de taludes de mineração e urbanos, além de possibilitar a determinação do modulo de deformabilidade. A Tabela 4.11 apresenta a estimativa de parâmetros de resistência, tais como a coesão e ângulo de atrito para maciços rochosos por meio da classe do RMR.

Tabela 4.11 - Determinação de parâmetros de resistência com base no valor da classe do RMR. Modificado de BIENIAWSKI (1989).

Classe nº	I	II	III	IV	V
Coesão do maciço rochoso (KPa)	>400	300-400	200-300	100-200	<100
Ângulo de atrito do maciço rochoso (°)	>45	35-45	25-35	15-25	<15

A estimativa do módulo de deformabilidade pode ser feita por meio da Figura 4.8, com a Equação 4.5, onde, E_m é o modulo de deformação *in situ* em GPa para RMR > 50.

$$E_m = 2RMR - 100 \qquad (4.5)$$

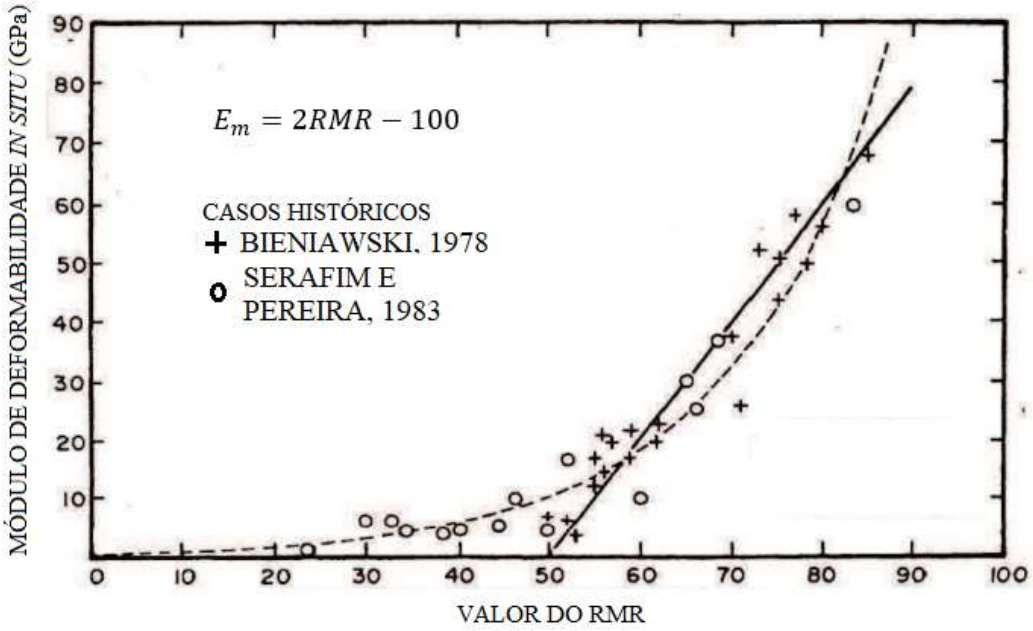


Figura 4.8 - Relação entre o módulo de deformabilidade e o RMR. Modificado de BIENIAWSKI (1989).

Para determinação do módulo de deformabilidade em casos em que o RMR é menor que 50, pode-se utilizar a Equação 4.6, proposta por SERAFIM & PEREIRA (1983).

$$E_m = 10^{(RMR-1\ )/40} \qquad (4.6)$$

Outra forma de estimativa de parâmetros de resistência do maciço rochoso utilizando o RMR é o critério de HOEK & BROWN (1980), definido pela Equação 4.7. Onde, σ_1 e σ_3 são as tensões principais maior e menor, respectivamente; σ_c a resistência à compressão uniaxial; m, a e s as constantes relativas às propriedades do maciço rochoso.

$$\sigma_1 = \sigma_3 + (m_b.\sigma_c.\sigma_3 + s.{\sigma_c}^2)^a \qquad (4.7)$$

As constantes m e s estão relacionadas às características do maciço rochoso, logo ao RMR, sendo possível a obtenção destes parâmetros pelo RMR. Posteriormente, neste texto, será verificado que estes parâmetros podem ser obtidos por meio do sistema GSI. Assim, as Equações 4.8 a 4.11 estabelecem as formas de obtenção desses parâmetros de resistência por meio do valor do RMR.

a) Para maciços rochosos não-perturbados:

$$m_b = m_i . \exp\left((RMR - 100)/28\right) \qquad (4.8)$$

$$s = \exp\left((RMR - 100)/9\right) \qquad (4.9)$$

b) Para maciços rochosos perturbados:

$$m_b = m_i . \exp\left((RMR - 100)/14\right) \qquad (4.10)$$

$$s = \exp\left((RMR - 100)/6\right) \qquad (4.11)$$

4.3. Aprendizado de máquinas, conceitos e aplicações

4.3.1. Conceitos iniciais

Os algoritmos de aprendizado de máquina podem ser divididos em dois grupos principais, a aprendizagem supervisionada e a aprendizagem não supervisionada. A aprendizagem supervisionada é utilizada para construir modelos preditivos. A aprendizagem não supervisionada é utilizada para criar modelos descritivos.

O modelo preditivo é aplicado para problemas que envolvem a previsão de uma variável a partir das demais variáveis do conjunto de dados. A variável que será prevista é comumente denominada como variável *target*. O algoritmo de aprendizado tenta descobrir e modelar o relacionamento entre a variável target e as demais variáveis. Como os modelos preditivos recebem instruções claras sobre o que precisam aprender, o processo de treinamento é conhecido como aprendizado supervisionado. Já em um modelo descritivo o objetivo é a identificação de padrões no comportamento das variáveis que culminem na identificação de grupos de amostra, ou seja, dividir um conjunto de dados em grupos homogêneos. Embora o algoritmo seja capaz de identificar os grupos, é necessária intervenção humana para interpretá-los (LANTZ, 2013).

Um exemplo clássico da literatura é o banco de dados Iris, proposto por FISHER (1936). Este banco é um dos conjuntos de dados mais antigos estudados por estatísticos e pesquisadores. Se trata de uma coleção de medidas de diferentes partes de 150 plantas de íris. Cada planta individual corresponde a um exemplo. As características de cada exemplo são as medidas de cada parte da planta: comprimento da sépala, largura da sépala, comprimento da pétala e largura da pétala. O conjunto de dados também registra a quais espécies cada planta pertence. Três espécies diferentes são representadas no conjunto de dados (GOODFELLOW *et al.* 2016).

Considerando um modelo preditivo para o banco de dados Iris, o aprendizado supervisionado utilizará as espécies (classes) no processo de aprendizado do modelo preditivo, que é feito com base nas características medidas de cada planta. Já o modelo não supervisionado criará um modelo com base nas características medidas de cada planta, agrupando as mais similares. Assim, os algoritmos de aprendizado não supervisionado aprendem propriedades úteis da estrutura do conjunto de dados, e os algoritmos supervisionados utilizam a variável *target* para aprendizado do modelo. A Tabela 4.12 apresenta algumas das principais técnicas de aprendizado de máquinas.

Tabela 4.12 - Principais técnicas de aprendizado de máquinas. Modificado de LANTZ (2013).

Aprendizagem supervisionada	
Técnica	Tarefa
Vizinho mais próximo (NN - *Nearest neighbor*)	Classificação
Naive Bayes	
Árvores de decisão (DT - *Decision Trees*)	
Regressão linear	Predição
Árvores de regressão (*Regression Trees*)	
Random Forest (RF)	Classificação / Predição
Redes neurais artificiais (ANN - *Artificial Neural Networks*)	
Máquinas de vetores de suporte (SVM - *Support Vector Machines*)	
Aprendizagem não supervisionada	
Técnica	Tarefa
Agrupamento hierárquicos	Agrupamentos / Classificação
K-means	
Fuzzy c-*means*	
PAM	
Mean-shift	
Mapas auto-organizáveis (*Self organizing maps*)	
Density-based spatial clustering of applications with noise (DBSCAN)	

Resumidamente, a aprendizagem não supervisionada envolve a observação do comportamento de várias amostras de um vetor aleatório X e a tentativa de aprender implicitamente ou explicitamente a distribuição de probabilidade $p(x)$ ou algumas propriedades interessantes dessa distribuição. Já o aprendizado supervisionado envolve observar o comportamento de várias amostras de um vetor aleatório X e um valor associado, ou vetor Y, ou seja, o algoritmo aprende a prever Y a partir de X. O termo aprendizado supervisionado se origina da visão do destino que está sendo fornecido por um "supervisor" ou professor que mostra ao sistema de aprendizado de máquina o que fazer. No aprendizado não

supervisionado, não há "supervisor" ou professor, e o algoritmo deve aprender a entender os dados sem este guia (GOODFELLOW *et al*., 2016).

4.3.2. Aplicações na área da engenharia de minas

Existem diversos estudos com aplicações de técnicas de aprendizado de máquina na área de mecânica de rochas com diferentes objetivos. A Tabela 4.13 apresenta alguns destes trabalhos, com seus respectivos autores, técnicas aplicadas e objetivos.

Tabela 4.13 - Alguns trabalhos com aplicações de técnicas de aprendizado de máquina.

Autores	Técnicas	Objetivos
MEULENKAMP e ALVAREZ GRIMA (1999)	ANN	Predição da resistência a compressão uniaxial.
SINGH *et al*. (2001)	ANN	Predição de propriedades de resistência.
GOKCEOGLU *et al*. (2004)	Fuzzy-ANN	Predição de propriedades de resistência.
SAKELLARIOU & FERENTINOU (2005)	ANN	Análise de condição de estabilidade de taludes.
LIU & CHEN (2006)	*Analytic Hierarchy Process* (AHP) e *Fuzzy Delphi method* (FDM)	Classificação de maciços rochosos.
MONJEZI *el al*. (2010)	ANN	Predição de propriedades geomecânicas com vistas ao desmonte de rochas.
ZARE NAGHADEHI *et al*. (2011)	*Probabilistic expert semi-quantitative* (PESQ)	Estudo da importância dos fatores que influenciam a estabilidade de taludes.
MELCHIORRE *et al*. (2011)	ANN	Predição da suscetibilidade em deslizamentos de terra.
SAMUI e KOTHARI (2011)	SVM	Análise de condição de estabilidade de taludes.

ZARE NAGHADEHI *et al.* (2013)	ANN	Construção de um índice de estabilidade para taludes de mina (MSII).
NEJATI *et al*. (2014)	ANN	Estimativa do modulo de deformabilidade utilizando as classes do RMR.
KLEN & LANA (2014)	Fuzzy K-means	Otimização no processo de determinação de famílias de descontinuidades.
LI *et al*. (2015)	Fuzzy	Análise de condição de estabilidade de taludes.
GARCÍA-GONZALO *et al.* (2016)	SVM	Construção de um modelo para determinação do vão livre crítico a partir do RMR em minas subterrâneas canadenses.
SANTOS *et al.* (2018) [1]	Diversas técnicas	Avaliação das condições de estabilidade de taludes de mina.
SANTOS *et al.* (2018) [2] SANTOS (2019)	Diversas técnicas	Construção de um sistema de avaliação de risco para taludes de mina rochosos (Has-Q).
OHADI *et al.* (2020)	DT e RF	Construção de um modelo para avaliar o desmonte de rochas (movimentação e fragmentação) a partir da resistência a compressão uniaxial e RQD.
SANTOS *et al.* (2020)	ANN	Predição da estabilidade de realces em minas subterrâneas brasileiras.
AHOUR *et al*. (2020)	ANN	Avaliação das condições de estabilidade de taludes de mina.
BARHAM *et al*. (2020)	ANN	Predição da resistência a compressão uniaxial.

Na Tabela 4.13 alguns estudos como os de SANTOS *et al.* (2018) [1] e SANTOS *et al.* (2018) [2] na parte de técnicas aplicadas está designado como “diversas técnicas”. Isto se deve ao fato dos autores terem utilizado conjuntos de técnicas, especificamente a análise discriminante. A análise discriminante é uma técnica da estatística multivariada em que são fornecidos ao algoritmo um conjunto de dados e suas respectivas classes. O algoritmo cria as

regras de discriminação entre as classes por meio de um aprendizado supervisionado. Logo, a análise discriminante pode ser considerada um algoritmo de aprendizado de máquina.

Atualmente, os avanços tecnológicos vêm promovendo um aumento no poder de aquisição, armazenamento e manipulação de dados nas áreas da engenharia de minas, o que reflete na variedade de aplicações da Tabela 4.13.

4.4. Técnicas da estatística multivariada

4.4.1. Introdução a estatística multivariada

A definição das variáveis de interesse é ponto de partida em qualquer projeto de pesquisa. Segundo PEREIRA (2015), as definições sobre "o que" medir e "como" medir são fundamentais na construção dos objetivos da pesquisa. A decisão por aplicação de técnicas da estatística multivariada se faz nesta perspectiva, uma vez que para mensurar as características físicas em maciços rochosos, pode-se fazer uso de ensaios e instrumentos de medidas tradicionais, no caso das variáveis quantitativas, e por categorização para o caso das variáveis qualitativas. Porém, para se avaliar a qualidade do maciço rochoso, não existem os instrumentos de medida, mas é sabido que esta qualidade é composição das outras variáveis que podem ser observadas e mensuradas.

Em relação a definição e ponto de partida, de acordo com HAIR et al. (2009) a análise multivariada se refere a todas as técnicas estatísticas que simultaneamente analisam múltiplas variáveis. Diversas são as técnicas da estatística multivariada com diferentes objetivos, tais como redução da dimensionalidade de bancos de dados, agrupamentos de amostras e/ou variáveis, construção de modelos de predição, problemas de classificação entre outros. Assim, a estatística multivariada pode ser aplicada, considerando a relação mútua entre um conjunto de variáveis influenciando diretamente uma variável "não mensurável" tal como a qualidade dos maciços rochosos.

4.4.2. Análise fatorial

4.4.2.1. Considerações iniciais

No contexto desta pesquisa a análise fatorial é a técnica estatística multivariada mais adequada para alcançar os objetivos desta primeira etapa que são os de definir as variáveis que controlam a qualidade dos maciços rochosos, dentre aquelas obtidas em mapeamento geotécnico. Faz se necessário enfatizar que, além da qualidade do maciço não ser diretamente

mensurável, as variáveis que determinam essa qualidade são assumidas apenas a partir de evidências empíricas. Embora estas evidências sejam resultantes de larga aplicação ao longo de muitos anos, não foram definidas com forte embasamento estatístico, a partir de modelo que consiga identificar as fontes de variabilidade para a medida dessa qualidade.

Segundo MINGOTI (2005), a análise fatorial tem como objetivo principal descrever a variabilidade original do vetor aleatório *X*, em termos de um número menor *m* de variáveis aleatórias, chamadas de fatores comuns e que estão relacionadas com o vetor original *X* através de um modelo linear. Neste modelo, parte da variabilidade de *X* é atribuída aos fatores comuns, sendo o restante da variabilidade de *X* atribuída às variáveis que não foram incluídas no modelo, ou seja, ao erro aleatório.

Assim, a análise fatorial busca identificar a variância comum subjacente entre as variáveis originais que refletem as "variáveis imensuráveis", e separar os erros não sistemáticos na medida. Em outras palavras, a análise fatorial busca identificar os constructos existentes em um conjunto de dados, além de fornecer meios para medi-los (PEREIRA, 2015).

4.4.2.2. Modelo fatorial ortogonal

Neste item será descrita, detalhadamente, a técnica de análise fatorial, de acordo com PEREIRA (2015) e MINGOTI (2005). Posto isso, suponha um vetor aleatório $\tilde{X} = \left[X_1, X_2, X_3, \ldots, X_p\right]^t$, com vetor de esperança $E(X) = \mu = \left[\mu_1, \mu_2, \mu_3, \ldots, \mu_p\right]^t$, e matriz de covariância Σ_{pxp}. O modelo de análise fatorial ortogonal estabelece as seguintes relações:

$$\begin{aligned} X_1 - \mu_1 &= l_{11}.F_1 + l_{12}.F_2 + \cdots + l_{1m}.F_m + \epsilon_1 \\ X_2 - \mu_2 &= l_{21}.F_1 + l_{22}.F_2 + \cdots + l_{2m}.F_m + \epsilon_2 \\ &\vdots \\ X_p - \mu_p &= l_{p1}.F_1 + l_{p2}.F_2 + \cdots + l_{pm}.F_m + \epsilon_p \end{aligned}$$

onde,

- $F_1, F_2, \ldots, F_m$ são os fatores comuns não observáveis;
- $\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots, \epsilon_p$ são os fatores específicos associados a cada variável;
- $l_{ij}, i = 1, 2, \ldots, p \; e \; j = 1, 2, \ldots, m$ são as cargas fatoriais;

A Figura 4.9 apresenta de forma gráfica um modelo fatorial, onde as setas que apontam para as variáveis indicam a fonte de uma variação que contribui para a medida dessas variáveis.

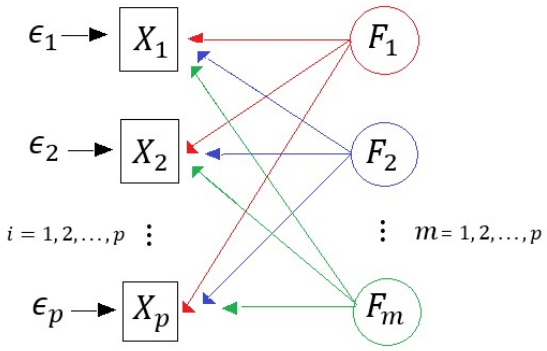


Figura 4.9 - Diagrama de caminhos de um modelo fatorial ortogonal. Modificado de PEREIRA (2015).

Assim, cada variável, possui $m + p$ fontes que contribuem para a variação, ou seja, m fatores comuns F e p fatores específicos ϵ. A Equação 4.12 apresenta o modelo na notação matricial.

$$\tilde{X} - \mu = LF + \epsilon \qquad (4.12)$$

Com $F = [F_1, F_2, F_3, \ldots, F_m]^t$, $\epsilon = [\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \ldots, \epsilon_p]^t$, e,

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & \cdots & l_{1m} \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & l_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{p1} & l_{p2} & \cdots & l_{pm} \end{bmatrix}$$

Para construção do modelo fatorial ortogonal, algumas suposições, para analisar o modelo proposto e interpretar suas componentes, se fazem necessárias:

- Os fatores comuns têm média igual a zero, variâncias iguais a 1 e não são correlacionados;
- Os erros têm média zero, são não correlacionados e não necessariamente têm a mesma variância;

- Os fatores e os erros são independentes, o que significa que apresentam fontes distintas de variação.

4.4.2.3. Análises preliminares

Anteriormente a qualquer aplicação de técnicas estatísticas faz-se necessário testes estatísticos que permitem avaliar a adequação do conjunto de dados para aplicação das técnicas pretendidas. Em relação à análise fatorial, dois testes são fundamentais, sendo o Teste de esfericidade de Bartlett (BTS) (BARTLETT, 1954) e a medida de adequação da amostra (KMO).

O Teste de Esfericidade de Bartlett (BTS) é um teste estatístico para verificação da presença de correlações significativas entre as variáveis. Assim, este teste examina toda a matriz de correlação, verificando se existem correlações significantes suficientes no conjunto de dados. Uma vez que a análise fatorial identificará fatores comuns, que são provenientes do comportamento semelhante entre variáveis, a existência de correlações é requisito básico.

O teste consiste na comparação entre a matriz de correlação das variáveis e a matriz identidade, sendo que a hipótese nula parte do pressuposto que a matriz de correlações é igual a matriz identidade, ou seja, não existe correlação suficiente. Posto isso, para a aplicação da técnica objetiva-se que a hipótese nula seja rejeitada.

Para quantificação da adequação da amostra é utilizado o coeficiente KMO (Kaiser-Meyer-Olkin) proposto inicialmente por KAISER (1970), que analisará o conjunto de todas as variáveis, e o teste da matriz anti-imagem, MSA (*Measure of sampling Adequacy*) que analisará cada variável, indicando a adequação separadamente. O coeficiente KMO, que é dado pela Equação 4.13.

$$KMO = \frac{\sum_{i \neq j} R_{ij}^2}{\sum_{i \neq j} R_{ij}^2 + \sum_{i \neq j} Q_{ij}^2} \qquad (4.13)$$

Onde R_{ij} é a correlação amostral entre as variáveis e Q_{ij}^2 é a correlação parcial. A correlação parcial entre duas variáveis é a correlação que existe entre elas quando todas as outras variáveis são consideradas constantes, ou seja, desconsidera-se a variabilidade (MINGOTI, 2005). Quando as correlações parciais são próximas de zero, o coeficiente KMO

está próximo de 1. De acordo com PEREIRA (2015), a relação entre as faixas de KMO e a interpretação da adequabilidade da amostra é mostrada na Tabela 4.14.

Tabela 4.14 - Relação entre os valores de KMO/MSA e sua interpretação (PEREIRA, 2015).

KMO/MSA	Interpretação
0,80 – 1,00	Excelente
0,70 – 0,80	Ótimo
0,60 – 0,70	Bom
0,50 – 0,60	Regular
0,00 – 0,50	Insuficiente

4.4.2.4. Propriedades

Como consequência da definição do modelo e das suposições apresentadas, decorrem as seguintes propriedades:

a) A matriz de cargas fatoriais L contém as covariâncias entre os fatores comuns e as variáveis observadas. De fato, observa-se, a Equação 4.14.

$$(\tilde{X} - \mu).F^t = (LF + \epsilon)F^t = LFF^t + \epsilon F^t \qquad (4.14)$$

Assim, tem-se que,

$$Cov(\tilde{X}, F) = E\left[\left(\tilde{X} - \mu\right)F^t\right] = E[LFF^t + \epsilon F^t] = E(LFF^t) + E(\epsilon F^t)$$

$$Cov\left(\tilde{X}, F\right) = LE(FF^t) + E(\epsilon F^t)$$

$$Cov(\tilde{X}, F) = L\ x\ 1 + 0$$

$$Cov(\tilde{X}, F) = L$$

Assim, esta equação indica que os termos l_{ij} da matriz de cargas L representam a covariância entre a variável X_i e o fator F_j.

b) Observa-se a Equação 4.15.

$$(\tilde{X} - \mu)(\tilde{X} - \mu)^t = (LF + \epsilon)(LF + \epsilon)^t = LFF^tL^t + LF\epsilon^t + \epsilon F^tL^t + \epsilon\epsilon^t \qquad (4.15)$$

Assim, tem-se que,

$$\Sigma = E(\tilde{X} - \mu)(\tilde{X} - \mu)^t = E(LFF^tL^t + LF\epsilon^t + \epsilon F^tL^t + \epsilon\epsilon^t)$$
$$\Sigma = E(LFF^tL^t) + E(LF\epsilon^t) + E(\epsilon F^tL^t) + E(\epsilon\epsilon^t)$$
$$\Sigma = LE(FF^t)L^t + LE(F\epsilon^t) + E(\epsilon F^t)L^t + E(\epsilon\epsilon^t)$$
$$\Sigma = LIL^t + L\ x\ 0 + 0\ x\ L^t + \Psi$$
$$\Sigma = LL^t + \Psi$$

Essa relação estabelece que a matriz de covariâncias Σ admite uma decomposição como uma soma de duas matrizes:

a) A primeira LL^t, é uma matriz simétrica de posto $m < p$. Esta matriz contém a parte comum ao conjunto de variáveis e depende das covariâncias entre as variáveis e os fatores.
b) A segunda, Ψ, é uma matriz diagonal e contém a parte específica de cada variável ou especificidade.

Esta decomposição implica que as variâncias das variáveis observadas podem ser escritas pela Equação 4.16.

$$\sigma_{ii} = l_{i1}^2 + l_{i2}^2 + \ldots + l_{im}^2 + \Psi_i = \sum_{j=1}^{m} l_{ij}^2 + \Psi_i, \text{ para } i = 1, 2, \ldots, p \qquad (4.16)$$

Onde Ψ_i é a especificidade, ou seja, a variância específica de X_i. Ela expressa o quanto da variabilidade de X_i não é explicada pelo modelo. Assim, o primeiro termo indica a soma dos efeitos dos fatores comuns (*comunalidade*) e o segundo, o efeito da "perturbação" (*especificidade*). Outra forma, amplamente adotada na literatura para a comunalidade está mostrada na Equação 4.17.

$$h_i^2 = \sum_{j=1}^{m} l_{ij}^2 \qquad (4.17)$$

Onde h_i^2 é a comunalidade, ou seja, a variância comum de $\tilde{X}$. Ela expressa o quanto da variabilidade de X_i é explicada pelo modelo. Além disso, as covariâncias entre as variáveis X_i e X_j são dadas pela Equação 4.18.

$$\sigma_{ij} = l_{i1}l_{j1} + l_{i2}l_{j2} + \ldots + l_{im}l_{jm}, \text{ para } i, j = 1, 2, \ldots, p \text{ e } i \neq j \qquad (4.18)$$

c) Se uma matriz L satisfaz a relação $\Sigma = LL^t + \Psi$, então existem infinitas matrizes $L*$ que também satisfazem essa relação. De fato, considere uma matriz ortogonal T, isto é $TT^t = T^tT = I$, qualquer. Seja $L* = LT$, então, $L*L*^t + \Psi = (LT)(LT)^t + \Psi = LTT^tL^t + \Psi = LIL^t + \Psi = \Sigma$.

4.4.2.5. Padronização das variáveis

De acordo com PEREIRA (2015), a utilização da matriz de covariância é restrita, uma vez que alguns métodos de estimação dos modelos fatoriais são muito sensíveis a diferenças de alta magnitude entre as variâncias. Posto isso, faz-se necessária a padronização das variáveis antes da análise fatorial. Assim, as covariâncias correspondem às correlações entre as variáveis e a decomposição dada pela relação $\Sigma = LL^t + \Psi$ deve ser feita sobre a matriz de correlações dos dados originais. Assim, ao realizar a análise sobre a matriz de correlações, tem-se as seguintes adaptações dos resultados:

a) As cargas fatoriais são as correlações entre as variáveis originais e os fatores comuns;
b) As comunalidades podem ser interpretadas como a proporção da variabilidade explicada pelos fatores.

4.4.2.6. Estimação do valor de m

Em relação à escolha do número de fatores deve-se sempre observar o compromisso entre o número de fatores e a capacidade de interpretá-los. Dentre os métodos, pode-se utilizar a análise da proporção da variação total relacionada com cada autovalor, para o caso da análise via matriz de covariância, ou retenção daqueles autovalores que representarem as maiores proporções da variação total no caso da análise via matriz de correlação. Além deste, pode-se utilizar os gráficos *screeplot* para seleção do número de fatores (PEREIRA, 2015; MINGOTI, 2005).

4.4.2.7. Métodos de obtenção dos fatores

Existem diferentes maneiras de se obter (extrair) os fatores, sendo o método das componentes principais, o método dos fatores principais e o método da máxima verossimilhança. De acordo com HAIR *et al.* (2009), a obtenção dos fatores pelo método das componentes principais considera a variância total e deriva fatores que contêm pequenas proporções de variância única e, em alguns casos, variância de erro. Já o método dos fatores

principais considera apenas variância em comum, assumindo que tanto a variância de erro quanto a única não são de interesse na definição da estrutura das variáveis (HAIR *et al.*, 2009). O método da máxima verossimilhança pressupõe a normalidade multivariada no banco de dados em estudo. A presente pesquisa optou pelo método das componentes principais, que será abordado em sequência.

Seja a matriz de covariâncias Σ com pares de autovalores e autovetores $((\lambda_i, e_i),\ i = 1,\ldots,m$, sendo m o número de autovalores retidos e $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_m$ $(m < p)$. Então pela decomposição espectral da matriz de covariâncias, têm-se:

$$\Sigma \approx \lambda_1 e_1 e_1^t + \lambda_2 e_2 e_2^t + \ldots + \lambda_m e_m e_m^t$$

$$\left[\sqrt{\lambda_1}e_1\ \sqrt{\lambda_2}e_2 \ldots\ \sqrt{\lambda_m}e_m\right]\begin{bmatrix}\sqrt{\lambda_1}e_1\\ \sqrt{\lambda_2}e_2\\ \vdots\\ \sqrt{\lambda_m}e_m\end{bmatrix} = \hat{L}\hat{L}^t$$

Segundo PEREIRA (2015), incluindo os fatores específicos no modelo, suas variâncias podem ser tomadas como elementos da diagonal de $\Sigma - \mathrm{LL^t}, onde\ \mathrm{LL^t}$ foi definido como acima. Assim,

$$\Sigma \approx \hat{L}\hat{L}^t + \Psi \approx \left[\sqrt{\lambda_1}e_1\ \sqrt{\lambda_2}e_2 \ldots\ \sqrt{\lambda_m}e_m\right]\begin{bmatrix}\sqrt{\lambda_1}e_1\\ \sqrt{\lambda_2}e_2\\ \vdots\\ \sqrt{\lambda_m}e_m\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\Psi_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \Psi_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \Psi_p\end{bmatrix}$$

Onde $\Psi_i = \sigma_{ii} - \sum_{j=1}^{m} l_{ij}^2$, para $i = 1, 2, \ldots, p$

Assim, $\hat{L} = \left[\sqrt{\lambda_1}e_1\ \sqrt{\lambda_2}e_2 \ldots\ \sqrt{\lambda_m}e_m\right]$ e $\Psi = \left(\Sigma - \hat{L}\hat{L}^t\right)$.

Note que, uma vez que os autovetores são ortonormais, isto é, $e_i^t e_i = 1$ e $e_i^t e_j = 0$, $i \neq j$, temos que $\sum_{j=1}^{p} l_{ij}^2 = \left(\sqrt{\lambda_1}e_1\right)^t \left(\sqrt{\lambda_1}e_1\right) = \lambda_j$, ou seja, os autovalores expressam a parcela da variabilidade total explicada pelo fator j.

4.4.2.8. Rotação dos fatores

De acordo com PEREIRA (2015), a análise fatorial é definida no espaço das colunas de uma matriz de cargas fatoriais, de forma que qualquer base desse espaço vetorial poderá ser uma solução. Assim, as soluções são obtidas com base na interpretabilidade dos fatores. Ainda, o citado autor explica que será mais fácil interpretar um fator quando este se associa fortemente a um bloco de variáveis observadas, sendo que isto ocorrerá se as colunas da matriz de cargas fatoriais contiverem valores altos para certas variáveis e pequenos para outras.

Essa ideia pode surgir de diferentes formas, dando origem a diversos critérios de rotação dos eixos. Esse sistema de rotação dos eixos aumenta o poder de interpretação dos fatores, a partir do momento que os as cargas fatoriais apresentarão maiores valores para os eixos rotacionados. A Figura 4.10 ilustra um processo de rotação. Na Figura 4.10 é possível observar que existem dois agrupamentos em relação as variáveis que é mais bem visualizado a partir da rotação dos eixos.

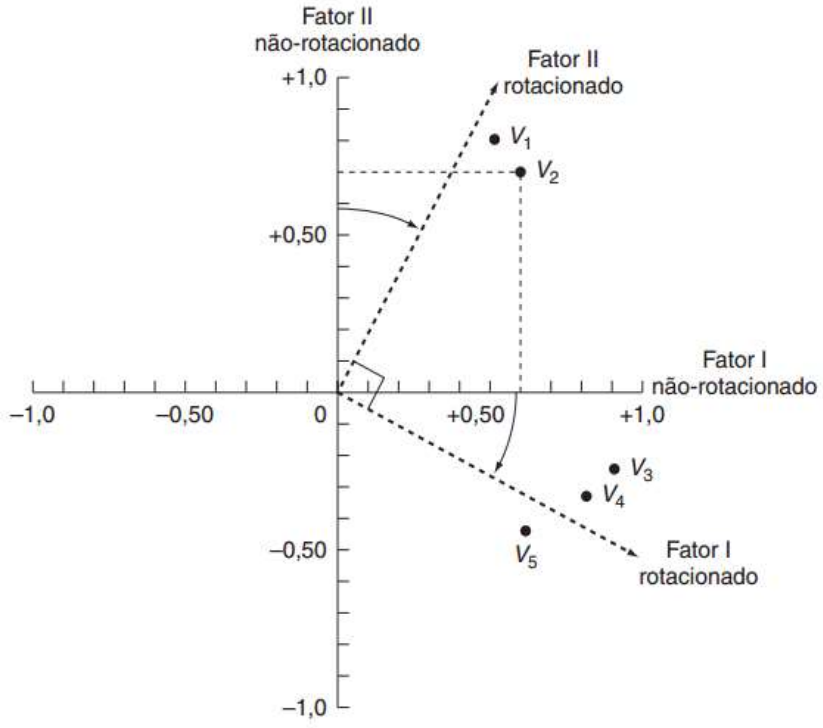


Figura 4.10 - Processo de rotação ortogonal (HAIR *et al.,* 2009).

HAIR *et al.* (2009) explicam que após a rotação dos eixos, as variáveis V_3, V_4 e V_5 apresentam cargas altas no Fator I, e as variáveis V_1 e V_2 têm cargas elevadas no Fator II. Logo, o agrupamento ou padrão dessas variáveis em dois grupos é mais óbvio após a rotação, ainda

que a posição ou configuração relativa das variáveis permaneça a mesma. Assim, o processo de rotação maximiza a interpretabilidade dos fatores.

O tipo de rotação aplicada nesta pesquisa se trata de uma rotação ortogonal (Figura 4.11), no qual os fatores rotacionados continuarão a ser não correlacionados, com as comunalidades e especificidades das variáveis inalteradas. O critério utilizado é o Varimax, que busca a melhor rotação do eixo, de modo que a nova matriz de cargas tenha maior número de coeficientes nulos.

No método Varimax, a interpretabilidade de um fator j é definida como a variância de suas cargas fatoriais ao quadrado de acordo com a Equação 4.19.

$$V_j = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{p}\left(\tilde{l}_{ij}\right)^4 - \frac{1}{p^2}\left(\sum_{i=1}^{p}\left(\tilde{l}_{ij}\right)^2\right)^2 \qquad (4.19)$$

Onde, $\tilde{l}_{ij} = \frac{l*_{ij}}{\hat{h}_i}$, para $j = 1, 2, \ldots, m$ e $l*_{ij}$ o coeficiente da i-ésima variável no j-ésimo fator após a rotação.

De acordo com PEREIRA (2015), quando a variância atinge um valor máximo, o fator tem a maior interpretabilidade, no sentido de que as cargas desse fator também tendem à unidade ou à zero. O critério seleciona os coeficientes que maximizam a soma dessa interpretabilidade, ver Equação 4.20.

$$V = \frac{1}{p}\sum_{j=1}^{m}\left[\sum_{i=1}^{p}\left(\tilde{l}_{ij}\right)^4 - \frac{1}{p}\left(\sum_{i=1}^{p}\left(\tilde{l}_{ij}\right)^2\right)^2\right] \qquad (4.20)$$

Os coeficientes finais da matriz transformada $\hat{L}* = \hat{L}T$ são $\hat{l}*_{ij} = \tilde{l}_{ij}h_i$, $i = 1, 2, \ldots, p$

4.4.2.9. *Scores* fatoriais

Os valores estimados dos fatores comuns para cada amostra, que são a representação de cada indivíduo no espaço fatorial, são conhecidos como *scores* fatoriais. Estes *scores* são com frequência utilizados como entrada em análises posteriores, no qual o objetivo é utilizar os fatores comuns como "novas variáveis". Dentre os métodos para obtenção dos *scores* destaca-se o método dos mínimos quadrados ponderados, onde deseja-se minimizar a Equação 4.21, sendo a solução para o j-ésimo fator dado pela Equação 4.22.

$$\sum_{i=1}^{p} \frac{\epsilon_i^2}{Var(\epsilon_i)} = \left(\tilde{X} - \tilde{\mu} - L\tilde{f}\right)^t \Psi^{-1} \left(\tilde{X} - \mu - Lf\right) \qquad (4.21)$$

$$\hat{f}_j = \left(\hat{L}^t \hat{\Psi}^{-1} \hat{L}\right)^{-1} \hat{L}^t \hat{\Psi}^{-1} \left(X_j - \bar{X}\right) \qquad (4.22)$$

4.4.3. Análise de agrupamentos

4.4.3.1. Considerações iniciais

A análise de agrupamentos é uma das técnicas da estatística multivariada cujo objetivo é o estudo da formação de grupos em um conjunto de dados. Segundo MINGOTI (2005), o objetivo da análise de agrupamentos é de dividir os elementos da amostra, ou população, em grupos de forma que os elementos pertencentes a um mesmo grupo sejam similares entre si com respeito a suas características (neste caso, as variáveis) que neles foram medidas, e os elementos em grupos diferentes sejam heterogêneos em relação a estas mesmas características.

Neste contexto a análise de agrupamentos classifica objetos, sendo que no interior de cada agrupamento formado os objetos são semelhantes entre si com base em um conjunto de características escolhidas. Assim, os agrupamentos resultantes devem exibir elevada homogeneidade interna. Em relação a agrupamentos distintos é observada elevada heterogeneidade. Assim, se a classificação for bem-sucedida, os objetos dentro dos agrupamentos estarão próximos quando representados graficamente, e diferentes agrupamentos estarão distantes (HAIR *et al.*, 2009).

JOHNSON & WICHERN (2018) ressaltam que a análise de agrupamentos constitui uma técnica mais primitiva, pois não são feitas suposições sobre o número de grupos ou a estrutura do grupo. O agrupamento é feito com base em semelhanças ou distâncias (dissimilaridades). Assim, as entradas necessárias são medidas de similaridade ou dados a partir dos quais as similaridades podem ser calculadas. A interpretação sobre o número e estrutura dos grupos formados é realizada posteriormente, e não anteriormente a aplicação da técnica.

PEREIRA (2015) destaca os dois extremos possíveis de classificação, sendo a classificação de todos os indivíduos em uma única classe ou a classificação de cada indivíduo como uma classe separada. Em relação aos métodos de agrupamentos existem dois grandes grupos, os métodos hierárquicos e os métodos não-hierárquicos.

Nos *métodos hierárquicos* o agrupamento é realizado em etapas. Os métodos hierárquicos podem ser classificados em aglomerativos ou divisivos. Por exemplo, em

aglomerativos a análise é iniciada considerando cada indivíduo sendo um grupo individual e assim os agrupamentos vão se formando sucessivamente considerando os subgrupos mais semelhantes. Já nos divisivos acontece de maneira oposta aos aglomerativos.

Nos *métodos não-hierárquicos* inicialmente é escolhido o número *k* de grupos que é desejado constituir. A classificação dos *n* indivíduos em *k* classes é realizada buscando maximizar a homogeneidade interna dos grupos (intra-grupos), e por consequência maximizar heterogeneidade entre grupos. Neste tipo de método é comum a utilização de "sementes" que buscam a realização de *n* iterações da técnica. A Tabela 4.15 apresenta os métodos de agrupamentos amplamente utilizados atualmente, com informações sobre ano de formulação, característica de formação, informações e publicação.

Tabela 4.15 - Métodos de clusterização mais utilizados. Modificado de CASSIANO (2014).

Ano	Característica de formação	Método de clusterização	Informações	Publicação
1948	Hierárquico	Ligação completa	Formação Aglomerativa	SORENSEN (1948)
1956	Não hierárquico	K-means	Realocação iterativa baseada em erro quadrático	STEINHAUS (1956)
1957	Hierárquico	Ligação Simples	Formação Aglomerativa	SNEATH (1957)
1963	Hierárquico	Ward	Minimiza o total de variância intra-clusters	WARD (1963)
1973	Não hierárquico	Fuzzy C-means	Lógica fuzzy	DUNN ((1973)
1989	Redes neurais artificiais	SOM – Mapa de Kohonen	Mapas auto organizáveis	KOHONEN (1989)
1989	Não hierárquico	PAM	*Partitioning around medoids* com realocacao iterativa	KAUFFMAN & ROUSSEEUW (1989)
1989	Hierárquico	DIANA	Formação Divisiva	
1989	Hierárquico	AGNES	AGglomerative NESting	

1996	Não hierárquico	DBSCAN	Dedicado para dados com ruído	ESTER *et al.* (1996)

4.4.3.2. Medidas de proximidade

A determinação das medidas de similaridade ou dissimilaridade entre amostras é o primeiro passo antes de uma análise de agrupamento. HAIR *et al.* (2005) definem proximidade como o grau de correspondência entre objetos ao longo de todas as características usadas na análise, ou seja, uma medida empírica de correspondência, ou semelhança, entre objetos a serem agrupados.

Em problemas de agrupamento de amostras, a proximidade geralmente é indicada por algum tipo de distância. Segundo JOHNSON & WICHERN (2018), são conhecidas diferentes maneiras de determinação de distância entre amostras. Assim, a escolha da medida de proximidade deverá levar em consideração a natureza das variáveis, escalas de medida e conhecimento do assunto.

Para descrição das principais medidas de proximidade para diferentes tipos de variáveis, baseado em PEREIRA (2015), considere $\tilde{X}_i = \left[x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}, \dots x_{ip}\right]^t$, $i = 1, 2, 3, \dots, n$, o vetor de observações da variável j no indivíduo i.

Para o caso de variáveis quantitativas as distâncias são as medidas de dissimilaridade mais utilizadas. Considere d_{ij} a medida de distância entre os indivíduos i e j. De acordo com PEREIRA (2015), d_{ij} só representa uma medida de distância se, e somente se: (a) $d_{ij} \geq 0$ para todo i e j; (b) $d_{ij} = 0$ se, e somente se, $i = j$; (c) $d_{ij} = d_{ji}$ (d) $d_{ij} \leq d_{ik} + d_{kj}$ para qualquer indivíduo k.

A medida de distância entre dois pontos no plano, mais comumente reconhecida é a distância euclidiana. A Equação 4.23 apresenta a distância euclidiana entre dois indivíduos i e j. Já a distância euclidiana generalizada entre dois indivíduos i e j é dada pela Equação 4.24.

$$d_{ij} = \sqrt{\left(\tilde{x_i} - \tilde{x_j}\right)^t \left(\tilde{x_i} - \tilde{x_j}\right)} = \sqrt{\sum_{k=1}^{p} (x_{ik} - x_{jk})^2} \qquad (4.23)$$

$$d_{ij} = \sqrt{\left(\tilde{x_i} - \tilde{x_j}\right)^t W \left(\tilde{x_i} - \tilde{x_j}\right)} \qquad (4.24)$$

Na Equação 4.38 W é a matriz composta por todos os autovalores positivos. Caso $W = V^{-2}$, ou seja, igual a matriz diagonal dos recíprocos das variâncias das variáveis (V^{-2}), temos a chamada distância euclidiana ponderada, que é a distância euclidiana entre os dados normalizados. Caso $W = diag\left(\frac{1}{p}\right)$, onde p é o coeficiente de correlação, tem-se a distância euclidiana média (PEREIRA, 2015).

Caso W seja igual a inversa da matriz de covariâncias tem-se a distância de Mahalanobis. Segundo HAIR *et al.* (2009) a distância de Mahalanobis é uma medida generalizada de distância que explica as correlações entre variáveis de uma maneira que pondera igualmente cada uma delas.

Outra medida, a distância de Minkowski está apresentada na Equação 4.25 para medida de distância entre dois indivíduos i e j.

$$d_{ij} = \left(\sum_{k=1}^{p} \left|x_{ik} - x_{jk}\right|^{\lambda}\right)^{\frac{1}{\lambda}} \qquad (4.25)$$

PEREIRA (2015) aponta algumas considerações para o parâmetro λ, sendo elas caso $\lambda = 1$, têm-se a distância de Manhattan; caso $\lambda = 2$, têm-se a distância euclidiana. O citado autor ainda comenta que a distância de Minkowski é menos afetada pela presença de valores discrepantes na amostra quando comparada a distância euclidiana.

As medidas de distâncias podem ser transformadas em medidas de similaridade. Para o caso dos indivíduos i e j, com medida de distância d_{ij}, sendo D_{nxn} a matriz de distâncias de todos os indivíduos, o coeficiente de similaridade entre os indivíduos é definido pela Equação 4.26 e 4.27.

$$d_{ij} = 1 - d_{ij}^{0} \qquad (4.26)$$

Em que,

$$d_{ij}^{0} = \frac{d_{ij} - \mathrm{mi}\ (D)}{\max(D) - \min(D)} \qquad (4.27)$$

Na Equação 4.41 $\min(D)$ e $\max(D)$ são respectivamente o menor e o maior valor de distância observados na matriz de distâncias D_{nxn}, sem levar em consideração os elementos da diagonal principal dessa matriz (PEREIRA, 2015).

Para o caso das variáveis qualitativas têm-se os coeficientes de concordância de Jaccard, de concordância simples, de concordância positiva e concordância de Gower e Legendre. Para a apresentação dos coeficientes citados, baseado em PEREIRA (2015), considera-se que a similaridade entre dois indivíduos será um, se ambos possuem uma determinada característica de interesse e zero, caso contrário. Considerando que as variáveis possuam o mesmo peso, pode-se medir a similaridade entre os indivíduos i e j, contando o número de atributos que estão presentes: em ambos os indivíduos, sendo representado por a; em i, mas não em j, representado por b; em j, mas não em i, representado por c; em nenhum dos dois indivíduos, representado por d. A Tabela 4.16 sumariza os índices descritos.

Tabela 4.16 - Índices de concordância (PEREIRA, 2015).

Indivíduo i	Indivíduo j		Total
	1	0	
1	a	b	$a+b$
0	c	d	$c+d$
Total	$a+c$	$b+d$	$p=a+b+c+d$

O coeficiente de concordância simples representa a proporção de variáveis em que há concordância nos valores dos indivíduos i e j. O coeficiente de concordância simples varia de 0 a 1 e está representado pela Equação 4.28.

$$s_{ij} = \frac{a+d}{a+b+c+d} \qquad (4.28)$$

O coeficiente de concordância positiva apresenta uma relação em que não é considerada concordância de ausência de atributo, como por exemplo o índice d. Assim, o coeficiente de concordância positiva considera apenas os pares do tipo $(1,1)$ e está representado pela Equação 4.29.

$$s_{ij} = \frac{a}{a+b+c+d} \qquad (4.29)$$

O coeficiente de concordância de Jaccard, Equação 4.30, tem o mesmo objetivo que o de concordância positiva, porém a proporção de pares concordantes é calculada em relação ao número total de pares, excluindo-se os pares do tipo $(0,0)$.

$$s_{ij} = \frac{a}{a+b+c} \qquad (4.30)$$

O coeficiente de concordância de Gower e Legendre é calculado com base na diferença entre concordâncias e discordâncias, relativamente ao número total de variáveis observadas. Assim, o coeficiente de concordância de Gower e Legendre pode assumir valores negativos. PEREIRA (2015) aponta que esta situação ocorre caso haja mais discordâncias do que concordância nos valores das variáveis para os indivíduos i e j. O coeficiente de concordância de Gower e Legendre é dado pela Equação 4.31.

$$s_{ij} = \frac{(a+d)-(b+c)}{a+b+c+d} \qquad (4.31)$$

4.4.3.3. K-means

De acordo com MINGOTI (2005) os métodos não hierárquicos têm como objetivo encontrar um agrupamento de n idividuos em k grupos, satisfazendo dois critérios básicos: coesão interna e isolamento dos *clusters* formados.

O método k-means é uma técnica de agrupamento que busca minimizar a distância quadrática média entre pontos no mesmo agrupamento. O algoritmo de Hartigan e Wong para aplicação do k-means será descrito em seguida.

O algoritmo de Hartigan e Wong procura a partição do espaço de dados com a soma dos quadrados dos erros (*Sum of Squares of Errors* - SSE) localmente ideal dentro do *cluster*. Isso significa que o algoritmo pode atribuir um caso a outro subespaço, mesmo que atualmente pertença ao subespaço do centroide mais próximo, se isso minimizar a soma total do quadrado dentro do *cluster*. Os casos são então atribuídos ao centroide mais próximo deles e os centroides são calculados como a média dos pontos de dados atribuídos.

As iterações são as seguintes, se o centroide foi atualizado na última etapa, para cada ponto de dados incluído, a soma dos quadrados dentro do *cluster* para cada ponto de dados, se incluído em outro *cluster*, é calculada. Assim, se um da soma do quadrado do novo *cluster*, Equação 4.32, for menor que o atual, Equação 4.33, tal que $SSE_2 < SSE_1$ o caso é atribuído a este novo *cluster*.

$$SSE_2 = \frac{N_i \sum_j \|x_{ij} - c_i\|^2}{N_i - 1} \qquad (4.32)$$

$$SSE_1 = \frac{N_1 \sum_j \|x_{1j} - c_1\|^2}{N_1 - 1} \qquad (4.33)$$

As iterações continuam até que nenhum caso mude de *cluster*, ou seja, até que uma mudança torne os *clusters* mais variáveis internamente ou mais semelhantes externamente.

Posto isso, o algoritmo k-means pode ser descrito basicamente da seguinte maneira:

1. Em geral escolhe-se arbitrariamente um número *k* de *clusters*, e assim atribui-se os centroides iniciais (atualmente existem métodos quantitativos para escolha do número de clusters);
2. Para cada indivíduo do banco de dados é calculada a distância em relação aos centroides de cada k *cluster*, assim, os elementos são alocados nos *clusters* que apresentaram a menor distância;
3. Realizado o passo 2, novos centroides são formados e então repete-se o passo 2;
4. Os passos 2 e 3 são repetidos até o momento em que nenhum individuo deve ser realocado em um *cluster* diferente.

O método k-means começa com *k* grupos aleatórios e então, no processo iterativo, moverá os indivíduos entre os grupos de forma a encontrar uma formação que minimize a variância dentro dos grupos e maximize a variância entre os grupos. Os critérios de qualidade procuram avaliar a variância dentro dos grupos (PEREIRA, 2015).

4.4.3.4. *Partitioning Around Medoids* (PAM)

O algoritmo PAM ou k-medoides, proposto por KAUFFMAN & ROUSSEEUW (1989), se trata de um algoritmo de agrupamento semelhante ao k-means. Os dois algoritmos são

técnicas de particionamento e ambos têm como objetivo minimizar a distância entre os pontos de um *cluster* e um ponto designado como centro desse *cluster*.

A diferença entre os algoritmos k-means e PAM está na determinação do centro do *cluster*. O k-means determina como centro do *cluster* o centroide, que é a média entre os pontos de dados. Já o algoritmo PAM escolhe o centro do *cluster* como um dos pontos de dados, que será denominado como medóide.

A seleção dos *k* medóides é resultado de um processo de otimização, assim como no k-means. Os *clusters* formados apresentaram os medóides cuja dissimilaridade média é mínima. O algoritmo calcula a dissimilaridade média entre o medóide e os pontos de dados em cada iteração, o medóide que apresentar menor dissimilaridade será o medóide final.

De acordo com VALE (2005) o algoritmo possui duas fases denominadas de construção e troca.

- Construção: os medóides são construídos. Eles são obtidos através de k seleções de objetos representativos. O primeiro objeto corresponde ao padrão onde a soma das dissimilaridades entre todos os padrões é mínima. Os objetos subsequentes são selecionados de forma a minimizar a função objetivo o máximo possível. A função objetivo é definida como a soma das dissimilaridades de todos os objetos ao medóide mais próximo (VALE, 2005).
- Troca: tenta-se melhorar o conjunto de medóides através da troca de objetos entre eles. Dessa forma, faz-se a troca entre objetos pertencentes a agrupamentos diferentes e computa-se o novo valor da função objetivo. Quando econômica, ou seja, quando a troca feita se mostra proveitosa, diminuindo o valor da função objetivo, ela é mantida; caso contrário ela é desfeita (VALE, 2005).

No contexto da presente pesquisa, tanto o k-means quanto o PAM apresentaram resultados pertinentes. Porém, considerando que as variáveis em estudo estão em forma de peso de acordo com a característica dos parâmetros geomecânicos, o PAM é o método mais recomendado, pelo fato do algoritmo utilizar como centro do *cluster* um medóide e não uma média como no caso do k-means. Logo, as dissimilaridades medidas são entre pontos e não entre uma média dos pontos. Além disso, fatores como a ampla utilização do método pela comunidade científica, simplicidade de aplicação e interpretação dos resultados, justificam a escolha do método.

4.4.3.5. Escolha do número de grupos

Existem diversas metodologias para determinação do número ótimo de grupos em uma análise de agrupamentos. A presente pesquisa utilizou duas das técnicas mais utilizadas na literatura que se trata do Método Elbow, primeiramente discutido por THORNDIKE (1953) e o Método da Silhueta proposto por ROUSSEEUW (1987). Um estudo que apresenta os algoritmos de Elbow e Silhueta além de comparar as técnicas para seleção do número de cluster pode ser verificado em YUAN & YANG (2019).

O Método da Silhueta apresenta uma estimativa da qualidade do agrupamento, apresentando a melhor separação entre diversos grupos. Assim, o método da silhueta apresenta um gráfico onde estão plotados a largura média da silhueta em função do número de *clusters*.

Cada observação tem um valor de silhueta, e a média destes valores constitui o valor médio da silhueta. Os valores de largura média da silhueta variam de -1 a 1, sendo interpretado como: largura média alta para valores próximo de 1, largura média baixa para valores próximo de 0 e largura com valores negativos. Para valores da silhueta com largura média alta existe um indicativo de um bom agrupamento. No caso dos valores de largura média baixa existe um indicativo de que as observações podem pertencer a dois grupos, neste caso recomenda-se a investigação de outras metodologias de agrupamento. No caso de observações com valores de largura negativa provavelmente estão alocadas erroneamente em um grupo (NAZARETH, 2020).

O Método Elbow utiliza o total da soma dos quadrados das distâncias das observações dentro de cada grupo. Esse valor de soma é plotado em função no número de *clusters*, construindo assim um gráfico. A prática atual para seleção do número de grupos indica a escolha de um valor a partir do qual não aumente de forma considerável o valor da soma. Este ponto se assemelha a um “cotovelo” no gráfico.

4.5. Técnicas da inteligência artificial

4.5.1. Redes neurais artificiais

4.5.1.1. Considerações iniciais

As Redes Neurais Artificiais (RNAs), amplamente conhecidas como *Artificial Neural Network* (ANN) são técnicas computacionais que apresentam um modelo matemático baseado na estrutura dos neurônios do cérebro animal. Essas redes artificiais adquirem conhecimento por meio da experiência, sendo, portanto, um sistema adaptativo.

Assim, as RNAs se baseiam nas redes neurais do cérebro animal e tentam reproduzir o comportamento básico e a dinâmica das funções das redes biológicas. Entre as similaridades dos dois tipos de redes, redes neurais do cérebro e as redes neurais artificiais, tem-se que os dois sistemas usam computação paralela e distribuída, se comunicam por meio de conexões sinápticas, possuem detectores de características, redundância e modularização das conexões.

De acordo com HAYKIN (2001), uma RNA é um processador completo, constituído de unidades de processamento simples, que têm a habilidade natural para armazenar conhecimentos experimentais e torná-los disponíveis para o uso, que se assemelha ao cérebro em dois aspectos:

- O conhecimento é adquirido pela rede por meio de dados do ambiente, num processo de aprendizagem, constituindo o processo de treinamento.
- As conexões entre os neurônios, conhecidas como “pesos”, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido.

O processo de treinamento é chamado de "Algoritmo de Aprendizagem", que tem como finalidade ajustar os pesos sinápticos da rede de uma forma ordenada para alcançar um objetivo desejado.

De acordo com BRAGA *et al.* (2000) os neurônios são divididos em três seções: o corpo da célula, os dendritos e o axônio, cada um com funções específicas, porém complementares. A Figura 4.11 representa os componentes de um neurônio biológico. As funções dos dendritos são receber as informações, ou impulsos nervosos, provenientes de outros neurônios e conduzi-las até o corpo celular. Neste ponto, a informação é processada e novos impulsos são gerados. Os novos impulsos gerados são transmitidos a outros neurônios, passando através do axônio até os dendritos dos neurônios seguintes. O ponto de contato entre a terminação axônica de um neurônio e o dendrito de outro é chamado de *sinapse*. É pelas sinapses que os nodos se unem funcionalmente, formando redes neurais biológicas.

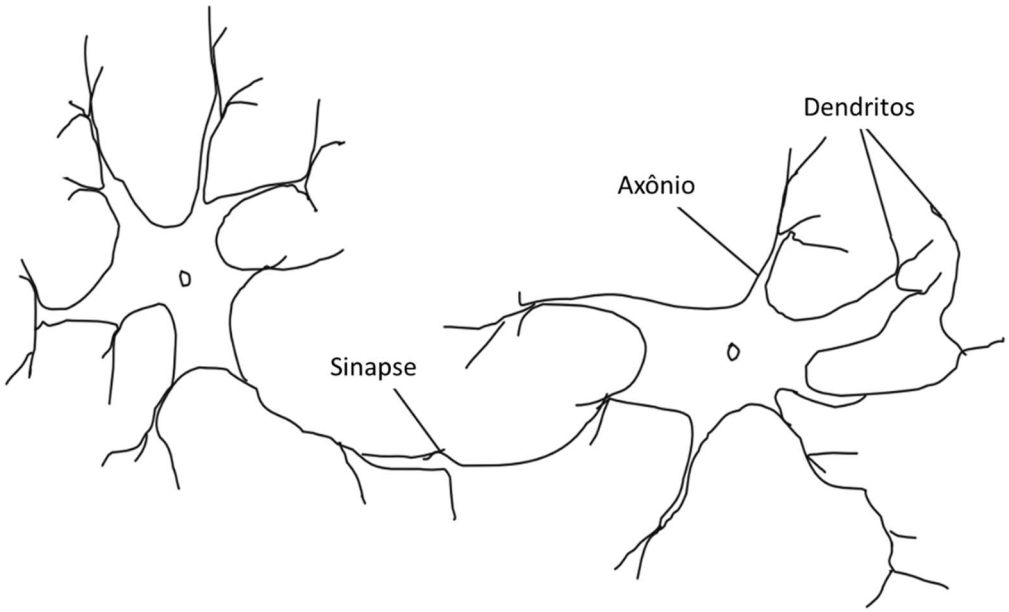


Figura 4.11 - Componentes do neurônio biológico. (Modificado de SHANMUGANATHAN & SAMARASINGHE, 2016).

BRAGA *et al.* (2000) explicam que as sinapses funcionam tal como válvulas, e são capazes de controlar a transmissão de impulsos entre os nodos na rede neural de modo que o efeito das sinapses é variável, e é esta variação que dá ao neurônio capacidade de adaptação. Os sinais oriundos dos neurônios pré-sinápticos são passados para o corpo do neurônio pós-sináptico, onde são comparados com os outros sinais recebidos por ele. Se o percentual em um intervalo curto de tempo é suficientemente alto, a célula "dispara", produzindo um impulso que é transmitido para as células seguintes (nodos pós-sinápticos). Este sistema simples é responsável pela maioria das funções realizadas pelo nosso cérebro.

4.5.1.2. Neurônios artificiais: Modelo MCP

O modelo proposto por Mcculloch-Pitts (Figura 4.12) é uma simplificação do neurônio biológico. Basicamente sua descrição matemática resultou em um modelo com *n* terminais de entrada $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$, representando os dendritos, e apenas um terminal de saída *y*, representando o axônio. Para emular o comportamento das sinapses, os terminais de entrada do neurônio têm pesos acoplados $w_1, w_2, w_3, \dots, w_n$, cujos valores podem ser positivos ou negativos, dependendo das sinapses correspondentes serem inibitórias ou excitatórias. O efeito

de uma sinapse particular i no neurônio pós-sináptico é dado por $x_i w_i$. Os pesos determinam "em que grau" o neurônio deve considerar sinais de disparo que ocorrem naquela conexão.

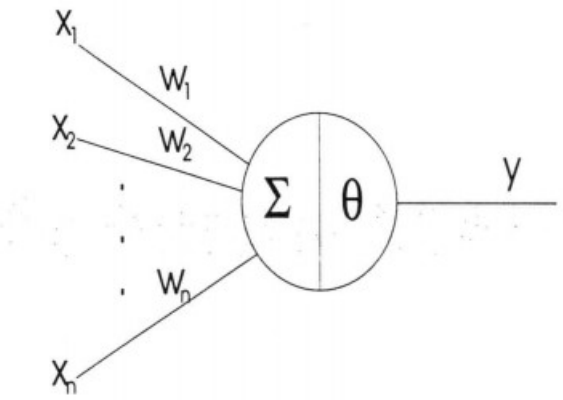


Figura 4.12 - Neurônio de McCulloch-Pitts. BRAGA *et al.* (2000).

No modelo MCP, BRAGA *et al.* (2000) explicam que um neurônio biológico dispara quando a soma dos impulsos que ele recebe ultrapassa o seu limiar, também conhecido como *threshold*, um valor fixo conhecido *a priori*. O corpo do neurônio, por sua vez, é emulado por um mecanismo simples que faz a soma dos valores $x_i w_i$ recebidos pelo neurônio e decide se o neurônio deve ou não disparar comparando o valor da soma obtida ao *threshold* do neurônio. Ainda no modelo MCP, a ativação do neurônio é obtida através da aplicação de uma "função de ativação", que ativa ou não a saída, dependendo do valor da soma ponderada das suas entradas. Na descrição original do modelo MCP, a função de ativação é dada pela função de limiar descrita na Equação 4.34 (BRAGA *et al.*, 2000). O nodo MCP terá então sua saída ativa quando:

$$\sum_{i=1}^{n} x_i w_i \geq 0 \qquad (4.34)$$

Posto isso, o modelo MCP apresenta algumas limitações no sentido de que o modelo apresentado na Figura 4.12 é aplicável apenas a problemas linearmente separáveis. Além disso, este modelo foi proposto com pesos fixos e não ajustáveis.

4.5.1.3. Funções de ativação

Posteriormente ao modelo de McCulloch-Pitts, diversos outros modelos foram propostos que permitem a produção de diferentes tipos de saída e com diferentes funções de

ativação. Atualmente existem diversos tipos de funções de ativação com aplicações na literatura, sendo algumas delas discutidas em sequência.

A função *threshold* é usada para classificações binárias, assim, a função assume duas saídas de acordo com o valor de x. A Equação 4.35 representa a função *threshold*, e a Figura 4.13 mostra a função.

$$f(x) = \begin{cases} 1 \; if \; x \geq 0 \\ 0 \; if \; x < 0 \end{cases} \qquad (4.35)$$

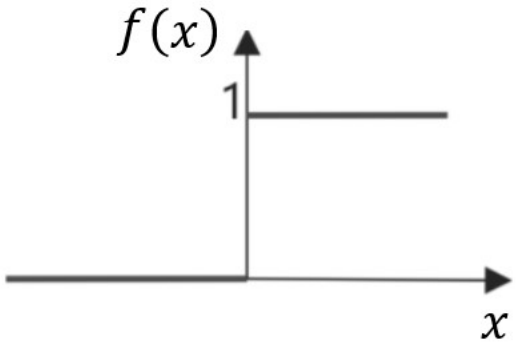


Figura 4.13 - Função *threshold*.

Segundo HAYKIN (2001), uma rede simples, com apenas uma camada de entrada e uma de saída, com função de ativação *threshold*, é conhecida como modelo de McCulloch-Pitts. Historicamente, foi o primeiro modelo publicado de redes neurais artificiais. Neste modelo, a saída de um neurônio é 1 se o campo local induzido desse neurônio for não negativo e 0, caso contrário. Esta declaração descreve o modelo de McCulloch-Pitts de propriedade de tudo ou nada.

A função sigmoide é a forma de função de ativação mais utilizada na construção de redes neurais. É definida como uma função estritamente crescente que exibe um equilíbrio entre o comportamento linear e não linear. A Equação 4.36 apresenta um exemplo da função sigmoide e a Equação 4.37 a derivada da função. A Figura 4.14 mostra a função sigmoide com o parâmetro crescente β.

$$f(x) = \frac{1}{1+\exp(-\beta x)} \qquad (4.36)$$

$$f'(x) = f(x)\big(1 - f(x)\big) \qquad (4.37)$$

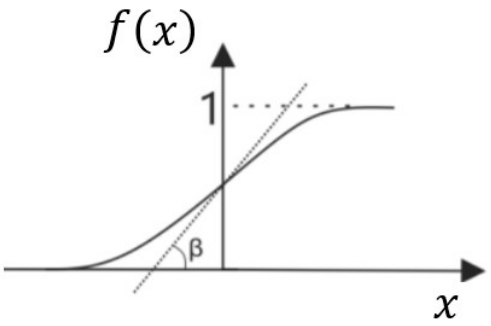


Figura 4.14 - Função sigmoide com o parâmetro β.

A função sigmoide já foi a mais utilizada em RNAs, pelo fato de os neurônios biológicos funcionarem de forma binária. Assim, a função sigmoide se trata de uma boa forma de modelar esse comportamento, já que assume valores apenas entre 0 e 1. Porém, apresenta problemas na propagação do gradiente para otimização do menor erro possível, ou seja, a função pode encontrar mínimos locais e não o mínimo absoluto, assim apresentando dificuldades no treinamento.

A função tangente hiperbólica, conhecida como função *tanh*, apresenta comportamento similar à função sigmoide, com formato de 'S', porém varia de -1 a 1, como pode ser observado na Figura 4.15. A *tanh* se aproxima mais da identidade, sendo assim uma alternativa mais atraente do que a sigmoide para servir de ativação às camadas ocultas (entre as camadas de entrada, input, e camadas de saída, output) das RNAs. A função *tanh* e sua derivada são dadas, respectivamente, pelas Equações 4.38 e 4.39.

$$f(x) = \frac{1-e^{-\beta x}}{1+e^{-\beta x}} = tanh(x) \quad (4.38)$$

$$tanh'(x) = 1 - tanh^2(x) \quad (4.39)$$

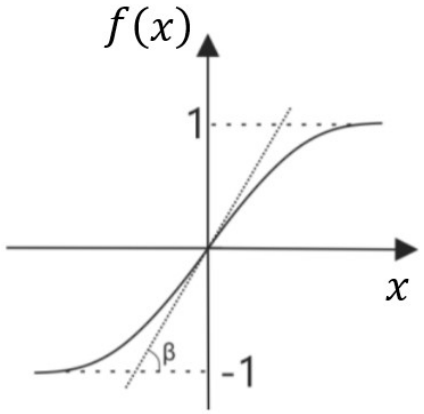


Figura 4.15 - Função tangente hiperbólica (*tanh*) com o parâmetro β.

A Figura 4.16 apresenta uma ilustração comparando as funções de ativação sigmoide e *tanh*.

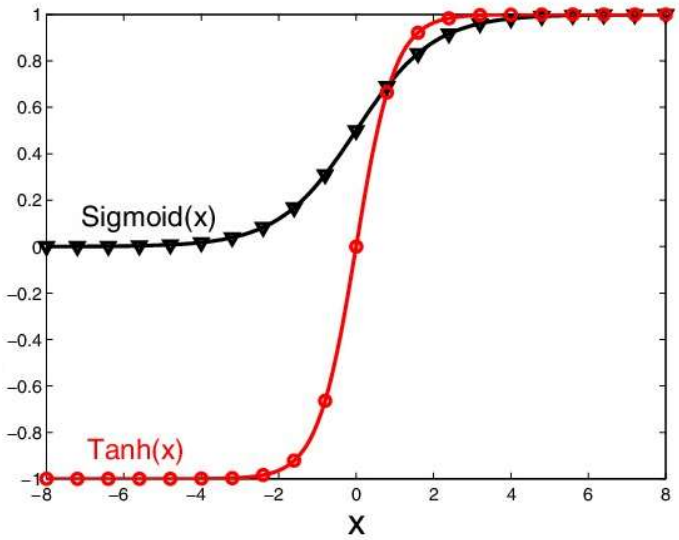


Figura 4.16 - Funções de ativação Sigmoide(x) e Tanh(x). Modificado de NAMIN *et al.* (2009).

4.5.1.4. Arquitetura das redes neurais artificiais

A arquitetura de uma RNA está diretamente relacionada com o tipo de problema que deverá ser solucionado. Redes com uma camada única, modelo MCP, por exemplo, só conseguem resolver problemas linearmente separáveis. De acordo com BRAGA *et al.* (2000) constituem parte da definição da arquitetura de um RNA os seguintes parâmetros: número de

camadas da rede, número de nós em cada camada, tipo de conexão entre os nós e topologia da rede. A Figura 4.17 apresenta exemplos de arquiteturas de RNAs.

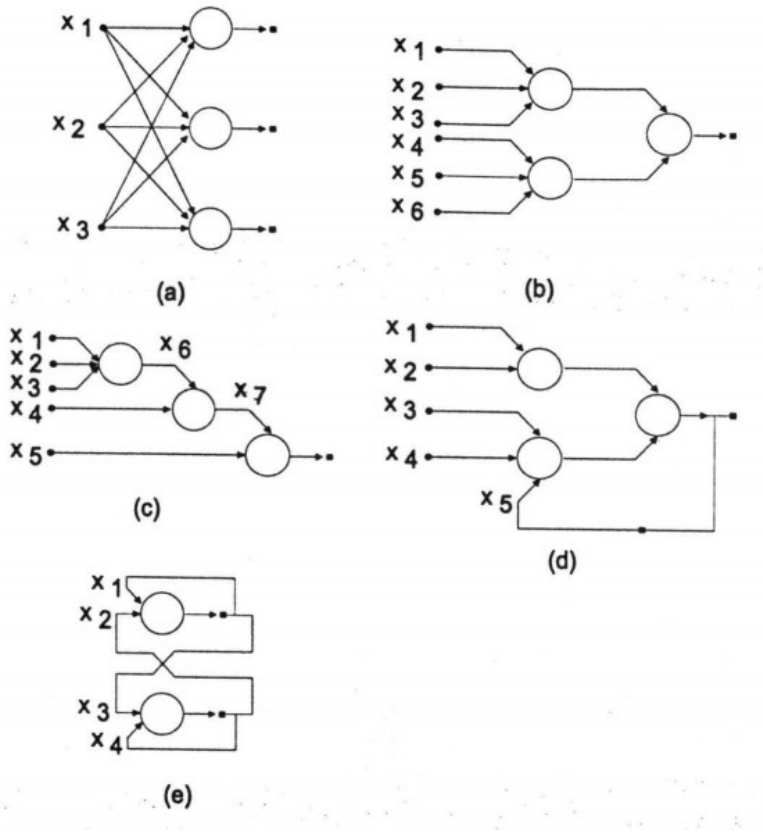


Figura 4.17 - Exemplos de arquiteturas de RNAs. (BRAGA *et al.*, 2000).

BRAGA *et al.* (2000) classifica as redes quanto ao número de camadas, podendo ser redes de camada única, Figura 4.17 (a) e Figura 4.17 (e), ou redes de múltiplas camadas como mostrado na Figura 4.17 (b), Figura 4.17 (c) e Figura 4.17 (d). No caso, a rede de apenas uma camada representa aquelas em que existe apenas um nó entre qualquer entrada e saída.

Além disto, existe a classificação dos tipos de conexão onde a rede pode ser *feedforward* ou *feedback*. Na rede *feedback* a saída de algum neurônio na i-ésima camada da rede é usada como entrada de nodos em camadas de índice menor ou igual a i, no caso a Figura 4.17 (d) e Figura 4.17 (e). Na rede *feedforward* a saída de um neurônio na i-ésima camada da rede não pode ser usada como entrada de nodos em camadas de índice menor ou igual a i, no caso representado pelas Figuras 4.17 (a), 4.17 (b) e 4.17 (c). Uma aplicação comum de redes *feedforward* é de desenvolver modelos não-lineares utilizados para classificação e reconhecimento de padrões. As redes *feedback* são cíclicas, ou seja, as redes associam um

padrão de entrada com ele mesmo sendo úteis em sistemas onde são permitidos a regeneração de um padrão de entrada. As redes *feedback* são mais biologicamente realistas.

4.5.1.5. Atualização dos erros

Em RNAs o erro pode ser definido como a diferença entre a saída desejada e a resposta calculada. Posto isso tem-se que o erro está relacionado com o conjunto de pesos, assim a atualização dos pesos tem o objetivo de minimizar a diferença entre a soma ponderada das entradas pelos pesos e a saída desejada, ou seja, o erro da resposta atual da rede. Assim, a Equação 4.40 apresenta a fórmula do erro, para a iteração t.

$$E(t) = saida\ esperada(t)\ -\ resposta\ calculada(t) \qquad (4.40)$$

A Equação 4.41 apresenta a forma genérica de atualização dos pesos para correção dos erros. Onde, $w_i(t+1)$ é o peso atualizado, $w_i(t)$ o peso atual, $E(t)$ o erro, n a taxa de aprendizagem e $x_i(t)$ a entrada para o neurônio i no tempo t.

$$w_i(t+1) = w_i(t) + n.E(t).x_i(t) \qquad (4.41)$$

4.5.1.6. Perceptron de múltiplas camadas - MLP

As redes de uma só camada resolvem apenas problemas linearmente separáveis. Para solução de problemas não linearmente separáveis, mais complexos são utilizadas as redes perceptron de múltiplas camadas - MLP. A Figura 4.18 apresenta uma rede MLP típica.

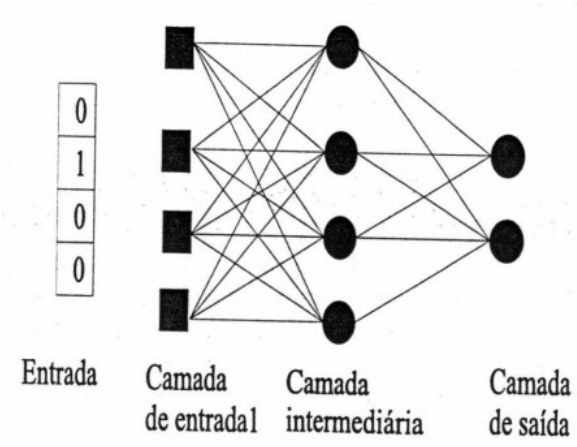


Figura 4.18 - Ilustração de uma rede MLP, com uma camada intermediária. Modificado de BRAGA *et al.* (2000).

Redes MLP apresentam um poder computacional muito maior do que aquele apresentado pelas redes sem camadas intermediárias. Teoricamente, redes com duas camadas intermediárias podem implementar qualquer função, seja ela linearmente separável ou não. A precisão obtida e a implementação da função objetivo dependem do número de nós utilizados nas camadas intermediárias (BRAGA *et al*., 2000).

O processamento realizado por cada nó em uma rede MLP é definido pela combinação dos processamentos realizados pelos nós da camada anterior que estão conectados a ele. Assim, na estrutura de uma MLP todo o processo é dependente, camada a camada.

CYBENKO (1989), HERTZ *et al.* (1991) e FUNUHASHI (1989) estudaram o número de camadas intermediárias ótimo para a implementação de classes de funções em uma RNA. Os resultados obtidos indicaram que com uma camada intermediária é suficiente para aproximar qualquer função contínua e duas camadas intermediárias são suficientes para aproximar qualquer função matemática.

Outro parâmetro importante é o número de nós nas camadas intermediárias, que em geral define-se empiricamente. Não existe padronização desse número, cada rede responderá de uma maneira diferente. De acordo com BRAGA *et al.* (2000) este número depende fortemente da distribuição dos padrões de treinamento e validação da rede. Alguns métodos, no entanto, têm sido propostos. Os mais utilizados são definidos em função do número de unidades em relação ao número de entradas e saídas. Por exemplo, o número de neurônios na camada interna igual ao número de entradas mais um neurônio, e o número de neurônios na camada interna igual ao número de neurônios na camada de entrada mais o número de neurônios na camada de saída dividido por dois.

Os problemas que podem ocorrer nas relações entre o número de neurônios nas camadas intermediárias são *overfitting* e o *underfitting*. O *overfitting* constitui o problema relacionado à memorização da rede e não extração de padrões de características. O *underfitting* está relacionado a não convergência da rede, devido ao excessivo número de exemplos em relação ao número de conexões.

4.5.1.7. Treinamento de Redes MLP

De acordo com BRAGA *et al.* (2000), os algoritmos para treinamento de redes MLP podem ser do tipo estático ou dinâmicos. Os algoritmos estáticos não alteram a estrutura da

rede, variando apenas os valores de seus pesos. Os algoritmos dinâmicos alteram a estrutura da rede, podendo tanto reduzir quanto aumentar o tamanho da rede.

O algoritmo *back-propagation* é um algoritmo supervisionado. O treinamento ocorre em duas fases, em que cada fase percorre a rede em um sentido. Estas duas fases são chamadas de fase *forward* e fase *backward*. A fase *forward* é utilizada para definir a saída da rede para um dado padrão de entrada. A fase *backward* utiliza a saída desejada e a saída fornecida pela rede para atualizar os pesos de suas conexões. A Figura 4.19 ilustra estas duas fases (BRAGA *et al.*, 2000).

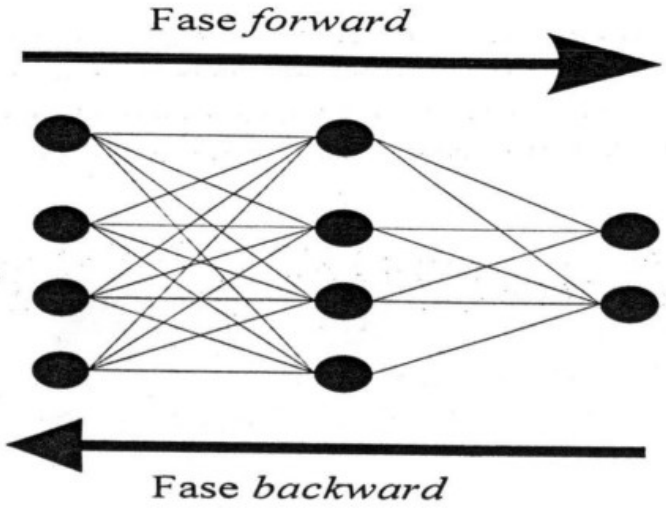


Figura 4.19 - Ilustração do algoritmo *back-propagation* (BRAGA *et al.*, 2000).

BRAGA *et al*. (2000) descrevem os processos de *forward* e *backward* e em seguida o algoritmo *back-propagation* de forma eficaz e didática, apresentado a seguir:

- Na fase *forward*:
  1) A entrada é apresentada à primeira camada da rede: a camada C^0.
  2) Para cada camada C^i a partir da camada de entrada:
     2.1) Após os nodos da camada C' (i > 0) calcularem seus sinais de saída, estes servem como entrada para a definição das saídas produzidas pelos nós da camada C^{i+1}.
  3) As saídas produzidas pelos nodos da última camada são comparadas às saídas desejadas.
- Na fase *backward*:
  1) A partir da última camada, até chegar na camada de entrada:
     1.1) Os nodos da camada atual ajustam seus pesos de forma a reduzir seus erros.

1.2) O erro de um nó das camadas intermediárias é calculado utilizando os erros dos nós da camada seguinte conectados a ele, ponderados pelos pesos das conexões entre eles.

- O algoritmo *back-propagation* pode ser descrito por meio dos seguintes passos:
  1) Inicializar pesos e parâmetros. Repetir até o erro ser mínimo ou até a realização de um dado número de ciclos:
  2) Para cada padrão de treinamento X
     2.1) Definir saída da rede através da fase *forward*.
     2.2) Comparar saídas produzidas com as saídas desejadas.
     2.3) Atualizar pesos dos nós através da fase *backward*.

Nesse processo, as iterações param quando um critério especificado é atendido, por exemplo, se todas as derivadas parciais absolutas da função de erro com relação aos pesos forem menores que um certo limite. Em relação aos algoritmos de aprendizagem, atualmente o *back-propagation* e seus aprimoramentos, como o *resilient back-propagation* (Rprop) proposto por RIEDMILLER & BRAUN (1993) e RIEDMILLER (1994) têm apresentado excelentes desempenhos nos estudos envolvendo aplicações de RNAs.

Embora o *back-propagation* seja amplamente utilizado, o algoritmo tem algumas limitações. O treinamento pode levar muitas iterações para convergir. Além disso, a função de erro está sujeita a ser perdida em mínimos locais, fazendo com que o erro de treinamento pare de diminuir e alcance um valor superior ao esperado, o que em definição têm-se o *underfitting*. Assim, com intuito de correção desses problemas algumas melhorias no algoritmo de *back-propagation* vêm sendo propostas.

De acordo com IGEL & HÜSKEN (2000), dentre as melhorias do algoritmo *back-propagation*, o *resilient back-propagation* (Rprop) é um dos métodos com melhor desempenho. O Rprop realiza uma adaptação local da atualização dos pesos de acordo com o comportamento da função de erro. De acordo com RIEDMILLER (1994) em relação ao princípio básico do Rprop ao contrário de outros algoritmos de descida do gradiente, o Rprop não usa a magnitude do gradiente $\partial E/\partial w$, mas apenas o seu sinal. Portanto, o gradiente da função de erro é calculado em relação aos pesos para encontrar uma raiz. Em particular, os pesos são modificados na direção oposta das derivadas parciais até que um mínimo local seja alcançado. A Figura 4.20 ilustra o processo do Rprop (GÜNTHER & FRITSCH, 2010).

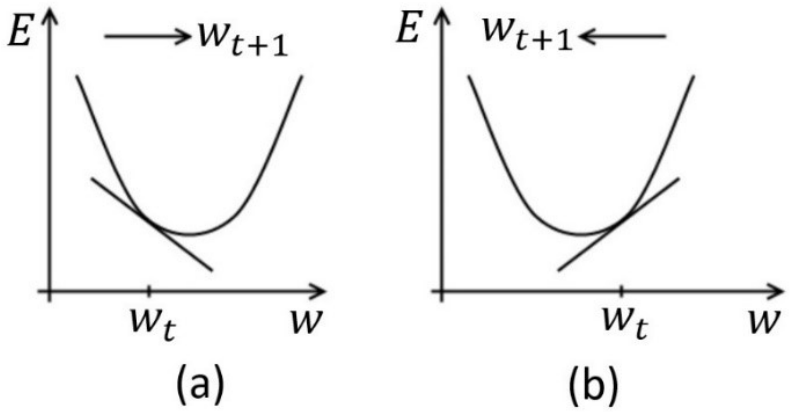


Figura 4.20 - Ilustração do processo do algoritmo Rprop. Modificado de GÜNTHER & FRITSCH (2010).

Na Figura 4.21, se a derivada parcial for negativa, o peso aumentará, conforme mostrado na Figura 4.21 (a). Se a derivada parcial for positiva, o peso diminuirá, conforme mostrado na Figura 4.21 (b). Portanto, um mínimo local é alcançado.

Dois problemas podem ocorrer em modelos preditivos de redes neurais artificiais, *overfitting* e *underfitting*. Um problema de *overfitting* ocorre quando, para a amostra de treinamento, o modelo tem um desempenho excelente; no entanto, quando os dados de teste são usados, o resultado é ruim. Então, neste caso, o modelo aprendeu tão bem as relações existentes no treinamento que acabou apenas memorizando e ao receber as informações das variáveis preditoras nos dados de teste, o modelo aplica as mesmas regras memorizadas, mas com dados diferentes esta regra não tem validade e o desempenho é afetado. No caso de *underfitting*, o desempenho do modelo já é ruim no próprio treinamento, utilizando a amostra de treinamento. O modelo não consegue ajustar as relações entre as variáveis. Portanto, o modelo com um problema de *underfitting* não deve ser usado. Nesse caso, é comum procurar outras funções de ativação e algoritmos de aprendizagem.

4.5.2. Árvores de decisão

A árvore de decisão, ou árvores de classificação, é uma técnica de aprendizado de máquinas para classificação e previsão de dados de forma supervisionada. O modelo é baseado em regras, do tipo "*if - else*", para classificação em estrutura semelhante a uma árvore (KUHN & JOHNSON, 2013).

O modelo é estruturado em nós, onde existem os nós de entrada, denominado nó raiz, os nós internos, denominados nós de decisão, e os nós terminais, também conhecidos como folhas. Os nós são conectados entre si por ramos, que são as decisões, e que indicam o caminho a ser seguido na árvore de acordo com a decisão tomada. Um conjunto de ramos que conecta a raiz até o nó terminal constitui uma das regras de classificação.

Para um problema bidimensional de classificação em cinco classes distintas, com variáveis x_1 e x_2, a Figura 4.21 apresenta a estrutura básica de uma árvore de decisão e sua respectiva representação no espaço. Em relação a estrutura da árvore de decisão na Figura 4.22 estão representados o nó raiz, os nós internos, nós terminais e os ramos com as respectivas decisões constituindo as regras de classificação.

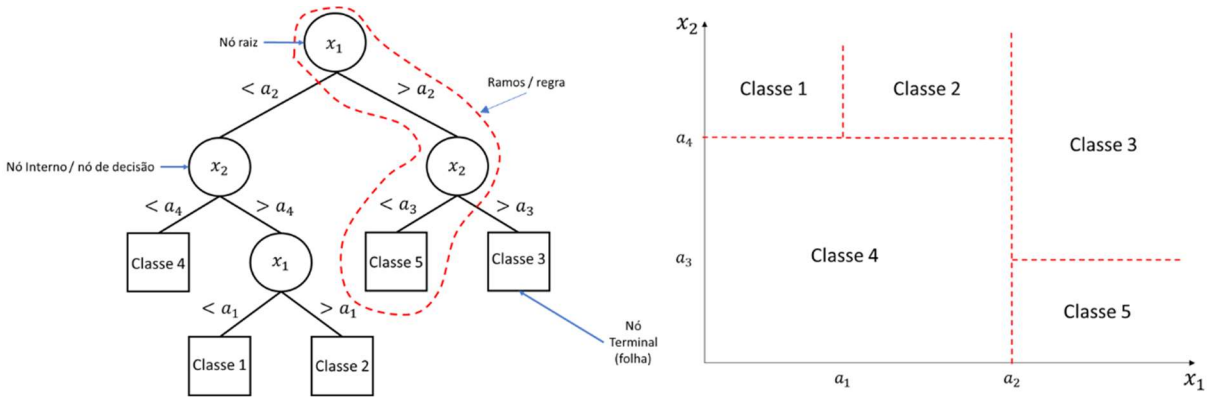


Figura 4.21 - Representação de uma árvore de decisão e sua respectiva representação no espaço. Modificado de SILVA (2005).

Assim, o modelo aprende uma série de decisões lógicas, semelhantes a um fluxograma, com nós de decisão que indicam uma decisão a ser tomada em relação a uma variável. A estrutura é dividida em ramos que indicam as escolhas de cada nó de decisão. A árvore é finalizada por nós terminais, também denominados de folhas, que denotam o resultado de seguir uma combinação de decisões (LANTZ, 2013).

Existem diferentes medidas para seleção do melhor particionamento na técnica de árvores de decisão. A maior parte dos algoritmos busca dividir os dados de forma a minimizar o grau de impureza dos nós que estão em sequência. A impureza pode ser compreendida como a distribuição de classes das amostras em cada nó, por exemplo, a impureza é nula em determinado nó se todos os exemplos nele pertencerem à mesma classe. Analogamente, o grau

de impureza é máximo no nó se houver o mesmo número de exemplos para cada classe possível (BASGALUPP, 2010).

O ganho de informação, dado pela Equação 4.42, é uma das medidas baseadas em impureza, nesta medida a entropia é utilizada como medida de impureza. Segundo VON ZUBEN & ATTUX (2010) para determinar a qualidade de uma condição de teste realizada, é necessário comparar o grau de entropia do nó-pai (antes da divisão) com o grau de entropia dos nós-filhos (após a divisão). Assim, o atributo que gerar uma maior diferença é escolhido como condição de teste.

$$ganho\ de\ informação = entropia(nó\ pai) - \sum_{j=1}^{n}\left[\frac{N(v_j)}{N} entropia(v_j)\right] \qquad (4.42)$$

Na Equação 4.42 onde n é o número de valores do atributo, ou seja, o número de nós-filhos, N é o número total de objetos do nó-pai e $N(v_j)$ é o número de exemplos associados ao nó-filho v_j. A Equação 4.43 determina o grau de entropia no nó.

$$entropia(nó) = -\sum_{i=1}^{c} p(i/nó).\log_2[p(i/nó)] \qquad (4.43)$$

Na Equação 4.57, $p(i/nó)$ é a fração dos registros pertencentes à classe i no nó, e c é o número de classes. Segundo VON ZUBEN & ATTUX (2010) o critério de ganho seleciona como atributo-teste aquele que maximiza o ganho de informação.

De acordo com BASGALUPP (2010) outra medida bastante conhecida é o Gini, a qual emprega um índice de dispersão estatística proposto em 1912 pelo estatístico italiano Corrado Gini. O índice Gini é utilizado no algoritmo CART (*Classification and Regression Trees*) proposto por BREIMAN *et al.* (1984), que é baseado na medida de impureza chamada $gini_{index}$. Neste caso, para um problema de c classes, o $gini_{index}$ é definido pela Equação 4.44.

$$gini_{index}(nó) = 1 - \sum_{i=1}^{c} p(i/nó)^2 \qquad (4.44)$$

Assim, como no cálculo do ganho de informação, basta calcular a diferença entre o $gini_{index}$ antes e após a divisão. Essa diferença, $Gini$, é representada pela Equação 4.45. Então, é selecionado o atributo que gerar um maior valor para o $Gini$ (BASGALUPP, 2010).

$$Gini = gini_{index}(nó\ pai) - \sum_{j=1}^{n}\left[\frac{N(v_j)}{N} gini_{index}(v_j)\right] \qquad (4.45)$$

Atualmente existem diversos algoritmos para indução de árvores de decisão, com destaque para ID3 - *Interative Dichotomizer* 3, proposto por QUINLAN (1986), C4.5, proposto por QUINLAN (1993), e o CART – *Classification and Regression Trees*, proposto por BREIMAN *et al.* (1984). Para a presente pesquisa foi utilizado o CART, que se trata de uma técnica não paramétrica, que será descrita em sequência. A escolha do CART foi baseada em função da aplicabilidade ao tipo de dado utilizado na pesquisa, além do algoritmo não impor regras em relação ao conjunto de dados para aplicação, o que adere aos objetivos da pesquisa. As principais vantagens do CART são a grande capacidade de pesquisa de relações entre os dados, mesmo quando elas não são evidentes, bem como a produção de resultados sob a forma de árvores de decisão de grande simplicidade e legibilidade (FONSECA, 1994).

As árvores geradas pelo algoritmo CART são sempre binárias, as quais podem ser percorridas da sua raiz até as folhas respondendo apenas a questões simples do tipo "sim" ou "não" (VON ZUBEN & ATTUX, 2010).

SANTOS (2019) descreve os passos para aplicação do algoritmo CART, sendo eles:

a) Inicialização no nó raiz, onde o input será composto por todos os indivíduos do banco de dados;
b) Dividir o nó de forma binária usando o critério de $Gini$, Equação 4.45.
c) Atribuir aos nós a classe ao qual a maioria dos indivíduos pertence.
d) Finaliza a construção da árvore de classificação utilizando como critério o erro de classificação mínimo.

4.5.3. Random forest

O random forest é basicamente um algoritmo de aprendizado de máquina para classificação multivariada não paramétrica. A técnica se trata de um método *ensemble* baseado em árvores de decisão, desenvolvidos por BREIMAN (2001). Os métodos *ensemble* treinam vários modelos de determinada técnica, utilizando o resultado de cada modelo treinado na

definição de um único resultado, obtendo-se assim um valor final único. Resumidamente, a técnica constrói árvores múltiplas com base em amostras e parâmetros, selecionados de forma aleatória, a partir do conjunto de dados de treinamento (BREIMAN, 2001).

BREIMAN (2001) definiu formalmente o random forest como um classificador composto por uma coleção n de árvores $\{h_k(x, T_k)\}$, tal que $k = 1, 2, \dots, n$, onde T_k são amostras aleatórias independentes e identicamente distribuídas e cada árvore vota na classe mais popular para a entrada x.

O algoritmo cria várias árvores de decisão de forma aleatória a partir de um subconjunto de observações dos dados inicial, com seleção aleatória tanto de variáveis, quanto de amostras. Portanto, o algoritmo escolhe de forma aleatória o conjunto de treinamento para criar o modelo. Os dados que não foram selecionados para criar o modelo são descritos como "out-of-bag" (OOB). De acordo com LIAW & WIENER (2002) neste ponto a seleção aleatória de variáveis permite ao algoritmo mensurar a importância de uma variável a partir da avaliação do erro de predição quando esta variável é utilizada no conjunto de treinamento. Em geral diversos modelos são construídos o que garante a participação de todas as variáveis e permite avaliar sua importância.

LANTZ (2013) apresenta uma lista dos pontos fortes e fracos dos modelos de random forest. O referido autor enfatiza que uma das principais vantagens desta técnica é a facilidade de aplicação e a menor propensão a *overfitting*. Dentre as vantagens da técnica têm-se um modelo multifuncional que funciona bem na maioria dos problemas, que pode lidar com dados faltando ou com ruído, permite implementação em variáveis categóricas ou contínuas, seleciona apenas as variáveis mais importantes e ainda, permite aplicação em banco de dados extensos. Já as limitações são a complexidade e impossibilidade de visualização quando comparado as árvores de decisão, o modelo não é facilmente interpretável e pode exigir algum trabalho para ajustar o modelo aos dados.

LIAW & WIENER (2002) descrevem as etapas do algoritmo para classificação e regressão com random forest, como sendo:

a) Seleção aleatória da amostra de treino: as amostras são selecionadas por reamostragem *bootstrap*;
b) Seleção das variáveis para cada nó: o algoritmo irá escolher de maneira aleatória duas ou mais variáveis, e então selecionar a variável para o nó. Para os nós em sequência a seleção

será feita da mesma maneira, de forma aleatória, porém excluindo as variáveis já selecionadas nos nós anteriores. Este passo se repete até o último nó da árvore;

c) Construção das próximas árvores: nesta etapa os dois processos anteriores serão repetidos, levando a criação de uma nova árvore. Nota-se que a cada árvore formada tem uma alta probabilidade de ser diferente das demais levando em consideração a seleção aleatória tanto das amostras como das variáveis em cada nó.

d) Previsão final: nesta etapa tem-se a avaliação dos resultados, no caso de classificação será decidido pelo voto majoritário sobre cada classe em cada árvore, e no caso de regressão será feito o valor médio encontrado em cada árvore.

A Figura 4.22 ilustra o algoritmo de classificação e regressão com random forest.

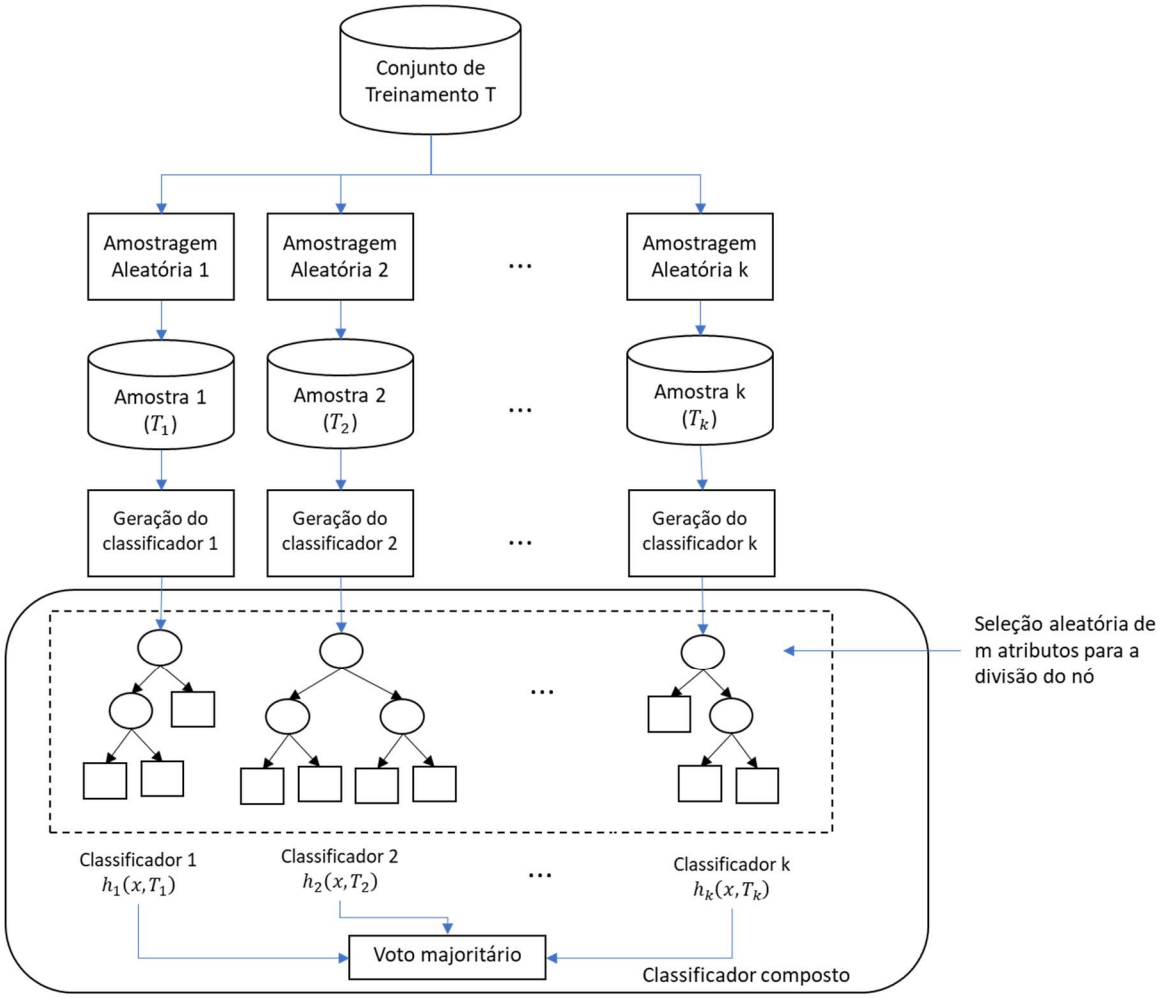


Figura 4.22 - Funcionamento do algoritmo de Random Forest (Modificado de OSHIRO, 2013).

Um parâmetro importante durante o treinamento do Random Forest é a taxa de erro, denominada OOB, que é uma taxa de erro obtida utilizando as amostras OOB de cada iteração durante o treinamento. Assim, em cada árvore construída as amostras OOB são utilizadas para verificação do treinamento, funcionando como uma validação interna pelo fato das amostras OOB serem excluídas pela amostragem *bootstrap*. Assim, é estimada a taxa de erro OOB (*OOB estimate of error rate*).

A partir da análise do algoritmo do Random Forest observa-se que dois parâmetros são importantes no ajuste do modelo, sendo eles o m_{try} e o n_{tree}. O n_{tree} é o número de árvores que serão construídas. Espera-se que o n_{tree} não seja um número muito pequeno, a fim de garantir que cada linha de entrada seja prevista pelo menos algumas vezes. O m_{try} é o número de variáveis amostradas aleatoriamente como candidatas em cada nó. Na prática atual, a Equação 4.46 é usada para problemas de classificação, e para problemas de regressão a Equação 4.47, onde p é o número de variáveis total do banco de dados.

$$m_{try} = \sqrt{p} \qquad (4.46)$$

$$m_{try} = \frac{p}{3} \qquad (4.47)$$

O Random Forest permite obter uma medida da importância das variáveis preditoras. Segundo LIAW & WIENER (2002), este é um conceito de difícil definição em geral, pois a importância de uma variável pode ser devido à sua interação (possivelmente complexa) com outras variáveis, neste ponto é recomendada a análise fatorial, que permite identificar a estrutura entre as variáveis e rotular os fatores comuns. O algoritmo de random forest estima a importância de uma variável observando quanto o erro de predição aumenta quando os dados (OOB) para essa variável são trocados, enquanto todos os outros permanecem inalterados (LIAW & WIENER, 2002).

4.5.4. Naive Bayes

Naive Bayes é um método de classificação por aprendizagem supervisionada com base em métodos Bayesianos, ou seja, na teoria da probabilidade. Na fase de treinamento em dados rotulados, o classificador calcula as probabilidades de uma amostra pertencer à sua classe com

base no valor de suas variáveis. Portanto, quando o classificador é usado posteriormente em dados não rotulados, ele usa as probabilidades observadas para prever a classe mais provável. Segundo LANTZ (2013), embora o método seja baseado em uma ideia simples, os resultados são semelhantes aos algoritmos mais sofisticados.

KUHN & JOHNSON (2013) explicam que a regra de Bayes responde à seguinte pergunta "*com base nas variáveis que observamos, qual é a probabilidade de que o resultado seja da classe* C_l*?*" Matematicamente, seja Y o rótulo da variável e X represente as características medidas das variáveis preditoras. A regra de Bayes estima $P_r(Y = C_l|X)$ que nada mais é que "*dado* X*, qual é a probabilidade de que o resultado seja a classe* l_{th}*?*" Para resolver o problema, é aplicada a regra de Bayes apresentada na Equação 4.48.

$$P_r(Y = C_l|X) = \frac{P_r(Y)P_r(X|Y = C_l)}{P_r(X)} \qquad (4.48)$$

Na Equação 4.48 $P_r(Y = C_l|X)$ é a probabilidade *a posteriori* da classe. $P_r(Y)$ é a probabilidade *a priori* do resultado. $P_r(X|Y = C_l)$ é a probabilidade condicional. $P_r(X)$ é a probabilidade dos valores do preditor (KUHN & JOHNSON, 2013).

LANTZ (2013) aponta os pontos fortes e fracos do algoritmo Naive Bayes. Os pontos fortes são: algoritmo simples, fácil de entender e treinamento rápido, além de eficiência; ampla aplicabilidade, apresentando bons resultados em bancos de dados com ruído e valores faltantes; não precisa de muitos exemplos de treinamento, mas funciona bem com muitos exemplos. Os pontos fracos são: o algoritmo assume que as variáveis são igualmente importantes e independentes; o treinamento pode ser afetado em bancos de dados com um grande número de recursos numéricos; as probabilidades estimadas são menos confiáveis do que as classes previstas (LANTZ, 2013).

A suposição de independência entre os preditores reduz significativamente a complexidade dos cálculos no modelo Naive Bayes. Por exemplo, para calcular a probabilidade condicional $P_r(X|Y = C_l)$, o produto das densidades de probabilidade para cada preditor individual é aplicado conforme mostrado na Equação 4.49 (KUHN & JOHNSON, 2013).

$$P_r(X|Y = C_l) = \prod_{j=1}^{P} P_r\left(X_J\middle|Y = C_l\right) \qquad (4.49)$$

Posto isso, o algoritmo Naive Bayes tem a regra geral das probabilidades. A base do modelo é a determinação das probabilidades condicionais e incondicionais associadas aos preditores.

A técnica de Naive Bayes não está isenta do problema de probabilidade zero. Esse problema ocorre quando uma determinada classe tem probabilidade igual a zero, ou seja, o caso de um preditor não possuir amostras no conjunto de treinamento para uma determinada classe. Nesse caso, a probabilidade condicional seria zero e, como as probabilidades são multiplicadas juntas, um preditor teria a probabilidade subsequente igual a zero (KUHN & JOHNSON, 2013). Para corrigir este problema, a correção de Laplace ou suavização de Laplace é aplicada. A correção de Laplace basicamente adiciona um pequeno número a cada uma das contagens na tabela de frequência, o que garante que cada recurso tenha uma probabilidade diferente de zero de ocorrer com cada classe. Normalmente, o estimador de Laplace é definido como 1, o que garante que cada combinação de recursos de classe seja encontrada nos dados pelo menos uma vez. Na prática, dado um conjunto de dados de treinamento grande o suficiente, a suavização de Laplace é desnecessária (LANTZ 2013).

4.5.5. Máquinas de vetores de suporte

4.5.5.1. Considerações iniciais

As máquinas de vetores de suporte, do inglês *Support Vector Machine* (SVM) é uma técnica de aprendizado de máquina baseado na teoria de aprendizado estatístico, proposta por VAPNIK (1995) a partir de estudos iniciados por VAPNIK & CHERVONENKIS (1971). O SVM é utilizado em problemas de classificação, regressão e previsão, se destacando principalmente pela precisão em problemas não lineares e de alta dimensão. A técnica em questão tem ganhado destaque atualmente pelas possibilidades de aplicação em diferentes tipos de problemas e principalmente pelo desempenho comparável aos obtidos pelas RNAs.

Segundo LANTZ (2013), o objetivo do SVM é criar um limite plano, denominado hiperplano, que leva a partições de dados bastante homogêneas. Nesse contexto, o processo de aprendizagem de um SVM combina aspectos de aprendizagem do vizinho mais próximo e modelagem de regressão linear. A combinação do processo de aprendizagem das duas técnicas permite ao SVM modelar relacionamentos altamente complexos.

As principais vantagens do SVM podem ser pontuadas como a boa acurácia em espaços de grandes dimensões, além de problemas em que o número de dimensões é maior que o número

de amostras e boa versatilidade em termos de uso de funções de decisão. Já as limitações do SVM são: problemas de *overfitting* em situações com número de variáveis muito maior que o número de amostras e o fato do SVM não fornecer estimativas de probabilidade diretamente (LANTZ, 2013).

4.5.5.2. SVMs lineares

LORENA & CARVALHO (2007) descrevem os passos para construção do SVM. Para isto, considere T um conjunto de treinamento com n dados $x_i \in X$ e seus respectivos rótulos $y_i \in Y$, onde X constitui o espaço de dados e $Y = \{-1, +1\}$. T é linearmente separável se é possível separar os dados de classe $+1$ e -1 por um hiperplano. Portanto, existem n amostras para o conjunto de treinamento, $(x_i, y_i), i = 1, \dots, n$, para um espaço d-dimensional, onde $x_i^T = (x_{i1}, \dots, x_{id}) \in R^d$.

Assim, a classe de uma amostra é dada por y com $y \in \{-1, +1\}$. Isso significa que o valor de y é +1 se à amostra x é atribuído a classe positiva. No caso do valor de y ser -1, à amostra x é atribuído a classe negativa (GARCÍA-GONZALO *et al.*, 2016).

A Equação 4.50 é conhecida como equação do hiperplano, onde $w \cdot x$ é o produto escalar entre os vetores w e x, $w \in R$ é o vetor de pesos ajustável e $b/\|w\|$corresponde à distância do hiperplano em relação à origem, com $b \in R$. A Figura 4.23 ilustra as constantes descritas.

$$f(x) = w.x + b \qquad (4.50)$$

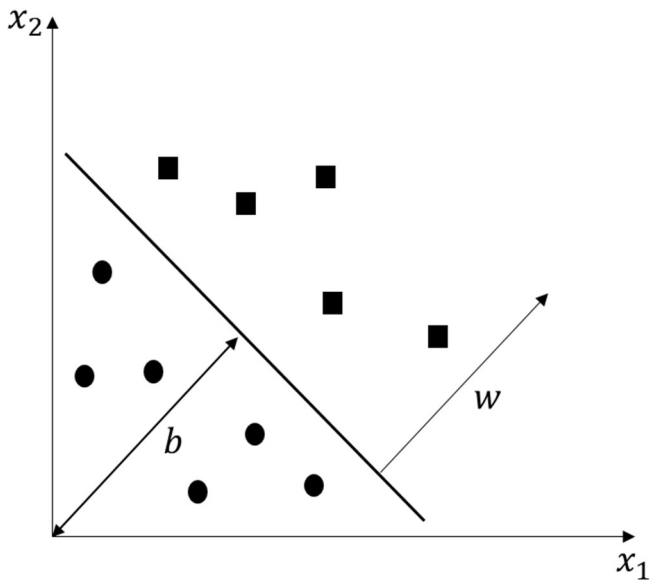


Figura 4.23 - Hiperplano de separação (w, b) para um problema de classificação em duas classes.

A partir da Equação 4.50 e da Figura 4.24, é possível perceber a divisão do espaço de dados X em duas regiões: $f(x) > 0$ e $f(x) < 0$, a partir daí a classificação pode ser aplicada por meio de uma função sinal, onde $g(x) = sgn(f(x))$. O sinal da função $g(x)$ permite obter as classes, como ilustrado na Equação 4.51.

$$g(x) = sgn(f(x)) = \begin{cases} +1 \; se \; w.x + b > 0 \\ -1 \; se \; w.x + b < 0 \end{cases} \qquad (4.51)$$

De acordo com LORENA & CARVALHO (2007) a partir de $f(x)$, é possível obter um número infinito de hiperplanos, multiplicando w e b pela mesma constante. O hiperplano canônico em relação ao conjunto T é definido como aquele em que w e b são escalados de forma que os exemplos mais próximos ao hiperplano satisfaçam as Equações 4.52 e 4.53.

$$|w.x_i + b| = 1 \qquad (4.52)$$

$$\begin{cases} w.x_i + b \geq +1 \; se \; y_i = +1 \\ w.x_i + b \leq -1 \; se \; y_i = -1 \end{cases} \qquad (4.53)$$

Logo, as Equações 4.64 e 4.65 podem ser resumidas de acordo com a Equação 4.54.

$$y_i(w.x_i + b) - 1 \geq 0, \forall(x_i, y_i) \in T \qquad (4.54)$$

Assim, na Figura 4.24 considere os pontos x_1e x_2 nos hiperplanos H_1 e H_2, de modo que H_1: $(w.x + b) = +1$ e H_2: $(w.x + b) = -1$.

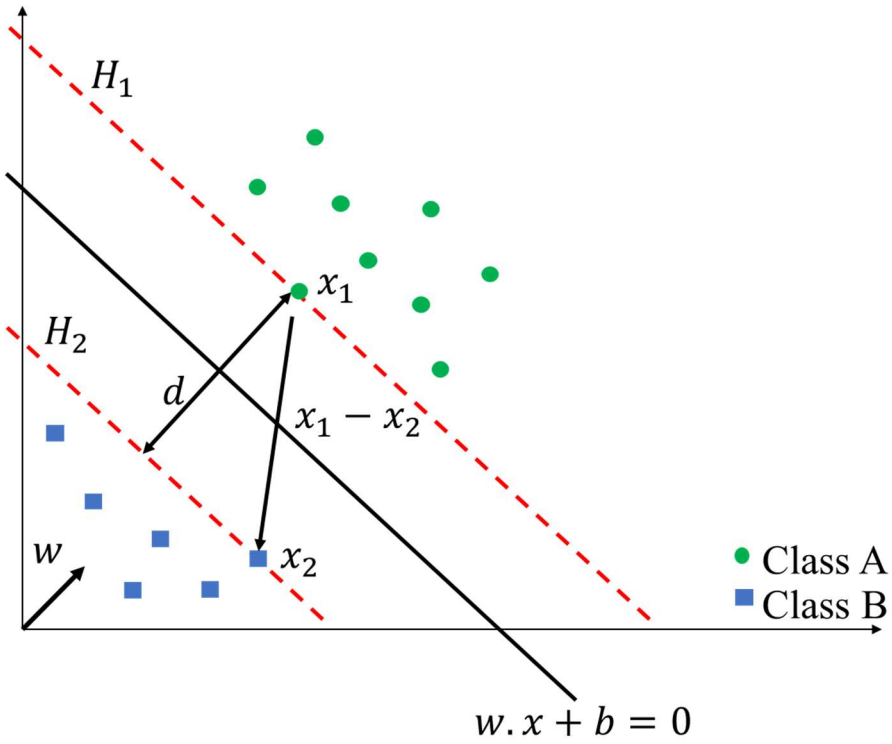


Figura 4.24 - Determinação da distância d entre os hiperplanos de separação. Modificado de HEARST *et al.* (1998).

A distância d entre os hiperplanos H_1 e H_2 pode ser obtida a partir da projeção da diferença $x_1 - x_2$ na direção do vetor w perpendicular ao hiperplano separador $w.x + b$. A diferença d entre os hiperplanos H_1 e H_2 está apresentada na Equação 4.55.

$$d = (x_1 - x_2)\left(\frac{w}{\|w\|}\frac{(x_1 - x_2)}{\|x_1 - x_2\|}\right) \qquad (4.55)$$

Considerando que $w.x_1 + b = +1$ e $w.x_2 + b = -1$, então $w.x_1 + b - (w.x_2 + b) = 2 \rightarrow w(x_1 - x_2) = 2$, então a Equação 4.56 é obtida.

$$d = \frac{2}{\|w\|}\frac{(x_1 - x_2)}{\|x_1 - x_2\|} \qquad (4.56)$$

De acordo com LORENA & CARVALHO (2007) como deseja-se obter o comprimento do vetor projetado, toma-se a norma da Equação 4.56, obtendo d a partir da Equação 4.57. Os citados autores explicam que como w e b foram escalados de forma a não haver exemplos entre H_1 e H_2, $1/\|w\|$ é a distância mínima entre o hiperplano separador e os dados de treinamento.

$$d = \frac{2}{\|w\|} \qquad (4.57)$$

Assim, o objetivo da solução de separação por SVM é maximizar a margem de separação de dados. Logo, o objetivo é minimizar $\|w\|$. Então, segundo SMOLA & SCHÖLKOPF (2002) o seguinte problema de otimização é apresentado na Equação 4.58, com a restrição $y_i(wx_i + b) - 1 \geq 0, \forall\, i = 1, \ldots, n$.

$$Minimizar_{w,b} = \frac{\|w\|^2}{2} \qquad (4.58)$$

SMOLA & SCHÖLKOPF (2002) explicam que este problema de otimização pode ser resolvido com a introdução de uma função Lagrangiana, que inclui as restrições à função objetivo, associadas aos parâmetros multiplicadores de Lagrange α_i. A solução é apresentada em Equação 4.59.

$$L(w, b, \alpha) = \frac{\|w\|^2}{2} + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i [y_i(wx_i + b) - 1] \qquad (4.59)$$

De acordo com MÜLLER *et al.* (2001) a função Lagrangiana deve ser minimizada, o que implica maximizar as variáveis α_i e minimizar w e b. A solução é apresentada nas Equações 4.60 e 4.61.

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i = 0, \qquad \alpha \geq 0 \qquad (4.60)$$

$$w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i \qquad (4.61)$$

Substituindo as Equações 4.60 e 4.61 na Equação 4.59, obtém-se o seguinte problema de otimização apresentado na Equação 4.62 (LORENA & CARVALHO, 2007).

$$Maximizar_{\alpha} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i x_j) \qquad (4.62)$$

$$sujeito\ as\ restrições: \begin{cases} \alpha_i \geq 0, & \forall\ i = 1, \dots, n \\ \sum_{j=1}^{n} \alpha_i y_i = 0 \end{cases}$$

LORENA & CARVALHO (2007) explicam ainda que, essa formulação é chamada de forma dual, enquanto o problema original é referido como forma primária. A forma dual tem a vantagem de apresentar restrições mais simples e permitir a representação do problema de otimização em termos de produtos internos entre os dados, o que será útil na não linearização subsequente de SVMs.

Considere a solução do problema dual como α^* e a solução do problema primal como w^* e b^*. Na Equação 4.63 é mostrado como w^* é obtido.

$$w^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* y_i x_i \qquad (4.63)$$

Segundo PONTIL & VERRI (1998) para o problema dual formulado, existe a Equação 4.64.

$$\alpha_i^* (y_i (w^* x_i + b^*) - 1) = 0, \forall\ i = 1, \dots, n \qquad (4.64)$$

A partir da Equação 4.64, pode-se perceber que α_i^* pode ser diferente de 0 apenas para os dados encontrados no H_1 e H_2. Estes são os exemplos mais próximos do hiperplano de separação, exatamente nas margens. Para os demais casos, a condição apresentada na Equação é obedecida apenas com $\alpha_i^* = 0$. Esses pontos não participam então do cálculo de w^*. Os dados que possuem $\alpha_i^* > 0$ são chamados de vetores de suporte (SVs) e são os dados mais informativos do conjunto de treinamento, pois somente participam da determinação da equação do hiperplano de separação (LORENA & CARVALHO, 2007).

O valor de b^* é calculado a partir dos SVs e das condições representadas na Equação 4.64. A média apresentada na Equação 4.65 é calculada sobre todo x_j tal que $\alpha_i^* > 0$, ou seja, todos os SVs. Na Equação 4.65, n_{SV} denota o número de SVs e SV representa o conjunto de SVs. Substituindo w^* na Equação 4.65, a Equação 4.66 é obtida (LORENA & CARVALHO, 2007).

$$b^* = \frac{1}{n_{SV}} \sum_{x_j \in SV} \frac{1}{y_j} - w^* x_j \quad (4.65)$$

$$b^* = \frac{1}{n_{SV}} \sum_{x_j \in SV} \left(\frac{1}{y_j} - \sum_{x_i \in SV} \alpha_i^* y_i x_i . x_j \right) \quad (4.66)$$

Assim, tem-se o classificador $g(x)$ apresentado na Equação 4.67, em que sgn representa a função sinal.

$$g(x) = sgn\big(f(x)\big) = sgn\big(\sum_{x_i \in SV} y_i \alpha_i^* x_i . x + b^*\big) \quad (4.67)$$

A Equação 4.67 representa o hiperplano que separa os dados com maior margem, considerado aquele com melhor capacidade de generalização de acordo com a teoria de aprendizado estatístico. Essa característica difere as SVMs lineares de margens rígidas das Redes Neurais Perceptron, em que o hiperplano obtido na separação dos dados pode não corresponder ao de maior margem de separação (LORENA & CARVALHO, 2007).

Para solução de problemas não-linearmente separáveis, as SVMs lineares com margens rígidas (para problemas linearmente separáveis) são estendidas para lidar com conjuntos de treinamento mais gerais. A extensão SVM é baseada na introdução de variáveis de folga ξ_i, para todo $i = 1, \dots, n$. Essas variáveis relaxam as restrições impostas ao problema de otimização primordial, que se torna a Equação 4.68.

$$y_i(w x_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad (4.68)$$

De acordo com BURGES (1998), um erro no conjunto de treinamento é indicado por $\xi_i > 1$. Portanto a soma de ξ_i representa um limite no número de erros de treinamento. Posto isso, a Equação 4.57 deve ser reformulada para a Equação 4.69.

$$Minimizar_{w,b,\xi} = \frac{\|w\|^2}{2} + C\left(\sum_{i=1}^{n} \xi_i\right) \qquad (4.69)$$

Na Equação a constante C é conhecida como parâmetro de penalização, e funciona como uma constante que controla a relação entre a complexidade do algoritmo e o número de amostras do conjunto de treinamento classificados incorretamente (TAKAHASHI, 2012).

A solução para o problema de otimização é semelhante à solução para o problema de otimização de SVMs com margens rígidas, com a introdução de uma função Lagrangiana. Assim, o resultado é o problema dual, apresentado na Equação 4.70.

$$Maximizar_{\alpha} \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j y_i y_j (x_i x_j) \qquad (4.70)$$

$$sujeito\ as\ restrições: \begin{cases} 0 \leq \alpha_i \leq C, & \forall\ i = 1, \ldots, n \\ \sum_{j=1}^{n} \alpha_i y_i = 0 \end{cases}$$

4.5.5.3. SVMs não lineares

A solução das SVMs lineares apresenta bons resultados para problemas linearmente separáveis, e para problemas de menor complexidade não-linearmente separáveis considerando a extensão das SVMs de margens suaves. Porém, existem muitos casos em que não é possível dividir satisfatoriamente os dados de treinamento por um hiperplano, como o exemplo apresentado na Figura 4.26.

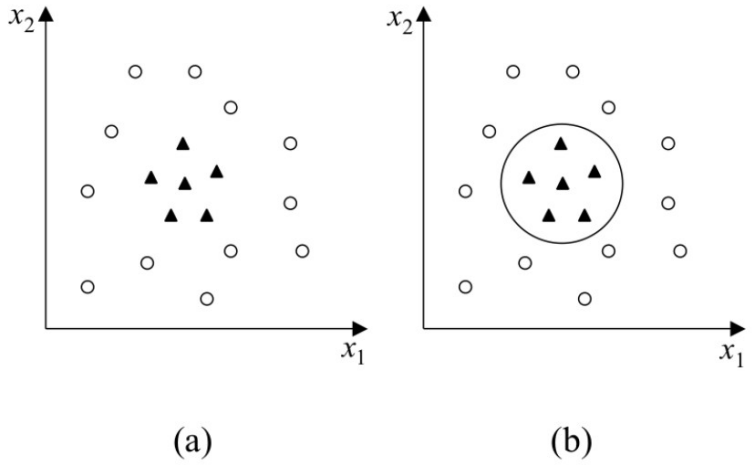


Figura 4.25 - (a) Conjunto de dados não linear; (b) Fronteira não linear no espaço de entradas (Modificado de MÜLLER *et al*., 2001).

Observando a Figura 4.25 é possível perceber a impossibilidade de separação das classes por um hiperplano considerando a dimensionalidade do problema. A separação ideal estaria colocada na Figura 4.26.

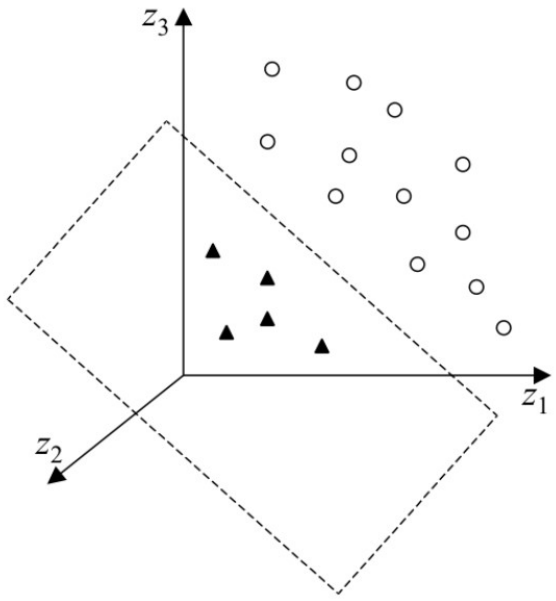


Figura 4.26 - Fronteira linear no espaço de características. (Modificado de MÜLLER *et al*., 2001).

De acordo com TAKAHASHI (2012) para realização desta tarefa é feito um mapeamento no domínio do espaço de entrada do conjunto de treinamento para um novo espaço, o espaço de características, usando uma função kernel apropriada. A solução do problema da Figura 4.25 estaria apresentado na Figura 4.26.

Ainda nas Figuras 4.25 e 4.26 é possível perceber que o conjunto de dados apresentando na Figura 4.25 foi transformado de R^2 para R^3 culminando na possibilidade de separação por um hiperplano. Assim, verifica-se a possibilidade de encontrar um hiperplano que seja capaz de separar esses dados podendo verificar que a função apresentada, embora linear em R^3 (Figura 4.26), corresponde a uma fronteira não linear em R^2 (Figura 4.25).

Posto isso, seja $\Phi: X \rightarrow \Gamma$ um mapeamento, em que X é o espaço de entradas e Γ denota o espaço de características. A escolha apropriada de Φ faz com que o conjunto de treinamento mapeado em Γ possa ser separado por uma SVM linear. Assim, transformando os dados de R^2 para R^3com o mapeamento representado na Equação 4.71, o conjunto de dados não linear em R^2 torna-se linearmente separável em R^3. É possível então encontrar um hiperplano capaz de separar esses dados, descrito na Equação 4.72 (LORENA & CARVALHO, 2007).

$$\Phi(x) = \Phi(x_1, x_2) = \left(x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2\right) \qquad (4.71)$$

$$f(x) = w.\Phi(x) + b = w_1x_1^2 + w_2\sqrt{2}x_1x_2 + w_3x_2^2 + b \qquad (4.72)$$

Assim, o procedimento é basicamente o mapeamento inicial dos dados para um espaço de maior dimensão utilizando Φ, e posteriormente aplica-se a SVM linear sobre este espaço encontrando o hiperplano com maior margem de separação. Utiliza-se a versão de SVM linear com margens suaves, que permite lidar com ruídos e outliers presentes nos dados. Para realizar o mapeamento, aplica-se Φ aos exemplos presentes no problema de otimização representado na Equação 4.70, conforme a Equação 4.73 (LORENA & CARVALHO, 2007).

$$Maximizar_\alpha \sum_{i=1}^{n} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \alpha_i\alpha_j y_i y_j \left[\Phi(x_i)\Phi\left(x_{jj}\right)\right] \qquad (4.73)$$

$$sujeito\ as\ restrições: \begin{cases} 0 \leq \alpha_i \leq C, & \forall\ i = 1, \dots, n \\ \sum_{j=1}^{n} \alpha_i y_i = 0 \end{cases}$$

Assim, o classificador extraído está apresentado na Equação 4.74 (LORENA & CARVALHO, 2007).

$$g(x) = sgn\big(f(x)\big) = sgn\big[\textstyle\sum_{x_i \in SV} \alpha_i^* y_i \Phi(x_i).\Phi\big(x_j\big) + b^*\big] \qquad (4.74)$$

LORENA & CARVALHO (2007) explicam que em geral, os problemas podem ter dimensões muito altas (até infinitas), portanto, o cálculo Φ pode ser extremamente caro ou inviável. Isso é feito usando funções chamadas Kernels ou função Kernel. Segundo HERBRICH (2001) a função Kernel pega dois pontos x_i e x_j do espaço de entrada e calcula o produto escalar desses dados no espaço de características, conforme a Equação 4.75.

$$K\big(x_i, x_j\big) = \Phi(x_i).\Phi\big(x_j\big) \qquad (4.75)$$

A utilização de kernels está na simplicidade de cálculos e na capacidade de representar espaços muito abstratos. As funções Φ devem pertencer a um domínio em que seja possível o cálculo de produtos internos, haja vista que temos $K\big(x_i, x_j\big)$ como um produto interno. No geral, utiliza-se o teorema de Mercer para satisfazê-las. Segundo o teorema, os kernels devem ser matrizes positivamente definidas, isto é, $K_{ij} = k\big(x_i, x_j\big)$, para todo $i, j = 1, \dots, n$, deve ter auto-vetores maiores que 0 (TAKAHASHI, 2012).

Alguns dos Kernels mais utilizados na prática são os Polinomiais, os Gaussianos ou RBF (*Radial-Basis Function*) e os Sigmoidais, listados na Tabela 4.17. Cada um deles apresenta parâmetros que devem ser determinados pelo usuário, indicados também na tabela. O Kernel Sigmoidal, em particular, satisfaz as condições de Mercer apenas para alguns valores de δ e k. Os Kernels Polinomiais com $d = 1$ também são denominados lineares.

Tabela 4.17 - Principais funções kernel e seus respectivos parâmetros. Modificado de LORENA & CARVALHO (2007).

Nome da função Kernel	Função Kernel	Parâmetros
Linear	$K(x_i, x_j) = (x_i . x_j)$	
Radial	$K(x_i, x_j) = exp\left(-\frac{\|x - x_i\|^2}{2\sigma^2}\right)$	σ
Polinomial	$K(x_i, x_j) = \left(\delta(x_i . x_j) + k\right)^d$	δ, k, d
Tangente hiperbólica	$K(x_i, x_j) = tanh(\delta(x_i . x_j) + k)$	δ, k

4.6. Métricas para avaliação de modelos de classificação

4.6.1. Modelos por aprendizagem supervisionada

A avaliação de modelos de classificação é um aspecto fundamental durante uma pesquisa em que são empregadas técnicas de aprendizado de máquina. Segundo KUHN & JOHNSON (2013) muitos modelos modernos de classificação são altamente adaptáveis, sendo capazes de modelar relacionamentos complexos. Porém, estes modelos podem enfatizar com facilidade padrões que não são reproduzíveis. Sem uma abordagem metodológica para avaliar os modelos ajustados, o modelador não saberá sobre o problema até que o próximo conjunto de amostras seja previsto.

Dentre os problemas que o modelo de classificação pode apresentar destacam-se o *underfitting* e o *overfitting*. O *underfitting* é caracterizado pela ineficiência do modelo de classificação, assim, o modelo de classificação não consegue aprender o suficiente sobre os dados de treinamento. Já o *overfitting* é caracterizado por um "super-ajuste" do modelo aos dados de treinamento, culminando em baixos erros durante o treinamento, porém quando se aplica o modelo em dados de teste este não apresenta um bom desempenho.

O problema do *underfitting* pode estar relacionado a:

- Banco de dados: dados insuficientes, adequação do tipo de dados a técnica em aplicação e amostragem com viés são os problemas mais comuns relacionado ao banco de dados e os problemas de *underfitting*;
- Parâmetros da técnica: a inadequação dos parâmetros pode resultar em *underfitting*, assim, recomenda-se o teste dos parâmetros para visualizar os melhores desempenhos no modelo. O teste para ajuste de parâmetros é conhecido com *tunning*;

- Adequação da técnica aos objetivos da pesquisa: a inadequação da técnica aos objetivos da pesquisa pode culminar em modelos com *underfitting*.

O problema do *underfitting* é de fácil percepção, como se trata de baixo desempenho do modelo em amostras de teste o pesquisador consegue visualizar nos primeiros estágios de teste do modelo. A solução para o problema do *underfitting* pode estar relacionada com os pontos descritos anteriormente. O problema do *overfitting* não apresenta percepção nos primeiros treinamentos do modelo e assim mais estudos devem ser aplicados ao modelo para identificar o *overfitting*.

Em relação ao *overfitting* existem diferentes métodos para estimativa de erros de generalização em modelos de classificação, e todos estão relacionados a seleção de amostra para treino e teste do modelo.

Dentre os métodos para avaliação de modelos de classificação destacam-se os de re-substituição e de reamostragem. Os métodos de re-substituição utilizam o mesmo conjunto de treinamento para estimar as métricas de avaliação do modelo. Já os métodos de reamostragem separam o banco de dados em amostra de treinamento e amostras de teste, e as métricas de avaliação do modelo são aplicadas apenas com as amostras de teste. Os métodos *hold-out*, *random subsampling*, validação cruzada com k partições são alguns exemplos mais utilizados para reamostragem (BASGALUPP, 2010).

Na técnica do *hold-out* é definida uma partição fixa no banco de dados que separa o conjunto em amostra de treino e teste, mutuamente exclusivas. Na literatura é comum a partição de 2/3 dos exemplos para treinamento, com o restante de 1/3 para teste. A Figura 4.27 ilustra o processo de partição do *hold-out*.

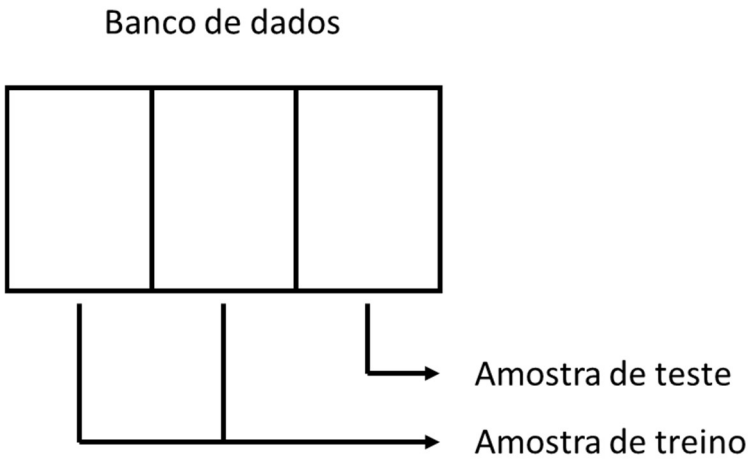


Figura 4.27 - Partição *hold-out*.

Na técnica de *random subsampling*, são criadas várias partições aleatórias no banco de dados, constituindo conjuntos distintos de treino e teste. Basicamente são vários *hold-out* aleatórios que são criados, assim para cada partição as métricas de avaliação são medidas, obtendo-se a estatística básica dessas métricas.

Já a técnica de validação cruzada com *k-partições*, o banco de dados é dividido em k subconjuntos mutuamente exclusivos de tamanhos iguais. Assim, o modelo será treinado k vezes, utilizando cada uma das k partições como amostra de treino e as demais como teste.

Os métodos de partição apresentados resultam em amostras de treino e amostra de teste. A amostra de treino para treinamento do modelo e a amostra de teste para verificar o desempenho do modelo em novos dados, não apresentados na fase de treinamento. Assim, as métricas de avaliação do modelo são aplicadas sobre os resultados do modelo na amostra de teste, por meio de uma matriz de confusão.

A matriz de confusão basicamente cruza os valores preditos com os reais, permitindo a visualização de classificações corretas e incorretas. Considerando um problema de classificação em duas classes, positivo e negativo, a Tabela 4.18 apresenta uma matriz de confusão.

Tabela 4.18 - Matriz de confusão.

	Classe predita	
Classe verdadeira	Positiva	Negativa
Positiva	VP	FN

Negativa	FP	VN

Na Tabela, VP são os verdadeiros positivos, que são os exemplos que pertencem a classe positiva e foram corretamente classificados, enquanto que FP são os falsos positivos que são os exemplos que pertencem à classe negativa, porém foram classificados como positivas. VN são os verdadeiros negativos, que são os exemplos negativos classificados corretamente e FN são os falsos negativos que são os exemplos positivos classificados como negativos. Assim, a partir dos valores de VP, FP, FN e VN é possível calcular facilmente várias medidas de desempenho do modelo de classificação (BASGALUPP, 2010).

A acurácia analisa a quantidade de acertos em relação ao total de classificações, é uma medida de probabilidade global de acerto, apresentada na Equação 4.76. A taxa de erro aparente é o complemento da acurácia, sendo assim analogamente a taxa de erro aparente pode ser calculada de acordo com a Equação 4.77.

$$Acurácia = \frac{VP+V}{VP+VN+FP+FN} \qquad (4.76)$$

$$Taxa\ de\ erro\ aparente = \frac{FP+}{VP+VN+FP+FN} \qquad (4.77)$$

A sensibilidade ou *recall* é a porção de verdadeiro positivo em relação ao total de positivos. Basicamente a sensibilidade indica a qualidade do classificador em classificar corretamente a classe de interesse, apresentada na Equação 4.78.

$$Sensibilidade = \frac{VP}{VP+FN} \qquad (4.78)$$

O valor predito positivo ou precisão é a porção de verdadeiro positivo em relação aos classificados como positivos, apresentada na que ação 4.79.

$$Precisão = \frac{VP}{VP+FP} \qquad (4.79)$$

A especificidade indica a porção de verdadeiros negativos em relação ao total de negativos. Basicamente a especificidade indica a qualidade do classificador em classificar corretamente outras classes, apresentada na Equação 4.80.

$$Especificidade = \frac{VN}{VN+} \qquad (4.80)$$

A eficiência é a média aritmética entre sensibilidade e especificidade, apresentada na Equação 4.81.

$$Eficiência = \frac{Sensibilidade+Especificida}{2} \qquad (4.81)$$

O teste de concordância Kappa (K), também conhecido por coeficiente de Kappa ou índice de Kappa, foi proposto por Jacob Cohen em 1960, com a finalidade de medir o grau de concordância entre proporções derivadas de amostras dependentes (FLEISS, 1981). O índice Kappa é outra forma de avaliar o desempenho de modelos de classificação, sendo um método estatístico que avalia o nível de concordância ou reprodutibilidade entre dois conjuntos de dados.

CONGALTON (1991) justifica a utilização do índice Kappa para avaliação de modelos pelo fato deste levar em consideração toda a matriz de confusão no seu cálculo, não estando restrito apenas aos elementos VF e VN, como a acurácia. O índice Kappa leva em conta a taxa de aceitação relativa (P_o), que é a acurácia, e a taxa hipotética de aceitação (P_e), que é a proporção de unidade que concordam por casualidade. As Equações 4.82, 4.83 e 4.84 apresentam as formas de obtenção das taxas e do índice Kappa, respectivamente.

$$P_o = \frac{VP+VN}{VP+VN+FP+F} \qquad (4.82)$$

$$P_e = 2.\frac{(VP+F\ ).(FP+V\ )}{(VP+VN+FP+FN)^2} \qquad (4.83)$$

$$Kappa = \frac{P_o-P_e}{1-P_e} \qquad (4.84)$$

Na Tabela 4.19 é apresentada a classificação dos diferentes níveis de concordância, valores de índice Kappa de acordo com LANDIS & KOCH (1977).

Tabela 4.19 - Níveis de concordância para os valores do índice Kappa. Modificado de LANDIS & KOCH (1977).

Valor do índice Kappa	Nível de concordância
< 0	Não existe concordância
0 – 0.20	Concordância mínima
0.21 – 0.40	Concordância razoável
0.41 – 0.60	Concordância moderada
0.61 – 0.80	Concordância substancial
0.81 – 1.00	Concordância quase perfeita

A curva ROC (*Receiver Operating Characteristic*) é um método gráfico para avaliação de modelos preditivos. O gráfico ROC é baseado na sensibilidade e especificidade, mostrando a região em que o modelo se comporta de maneira perfeita e a região em que o modelo se comporta de maneira aleatória. A Figura 4.28 apresenta um gráfico ROC para dois hipotéticos modelos A e B.

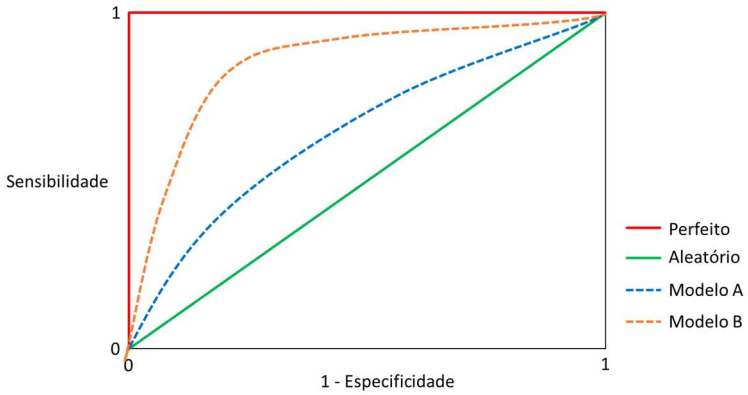


Figura 4.28 - Curva ROC para diferentes modelos.

Para análise da curva ROC, na Figura 4.28, a curva vermelha indica um modelo perfeito, ideal, que significa que o classificador consegue especificidade e sensibilidade total. Na curva verde tem-se o modelo aleatório, o que configura a pior situação para um modelo de predição. Espera-se de um modelo de classificação sempre melhor desempenho que a curva aleatória. Em

geral quanto mais próximo da curva perfeita, melhor o ajuste do modelo. Assim uma análise *a priori* dos modelos A e B, indicam um melhor desempenho do modelo B.

Outra métrica importante relacionada a curva ROC é a área abaixo da curva, ou AUC. A área abaixo da curva do modelo perfeito é 1,0 e a área da curva do modelo aleatório é 0,5. Portanto, quanto maior o AUC melhor é o modelo.

4.6.2. Modelos por aprendizagem não supervisionada

Os modelos criados pela análise de agrupamentos funcionam como modelos descritivos. Logo, a descrição do modelo faz parte do processo de validação da técnica. Deve-se buscar grupos que são interpretáveis e distintos estatisticamente.

Para validação do modelo por aprendizagem não supervisionada foram utilizados métodos internos e externos. Dentre os métodos internos destacam-se a estatística Hopkins, que verifica a tendência de agrupamento do banco de dados, o teste estatístico MANOVA que verifica se os *clusters* são realmente grupos distintos e por fim as ferramentas de visualização para verificar a formação dos *clusters*, por meio de gráficos de dispersão a partir da redução da dimensionalidade do banco de dados. Já como métodos externos buscou-se a interpretabilidade dos *clusters* formados verificando a distribuição dos valores das variáveis presentes em cada *cluster*.

Acerca da estatística de Hopkins de acordo com NAZARETH (2020), considerando o conjunto de dados Y, dois outros conjuntos são considerados, sendo eles uma amostra do conjunto Y, denominada Y^*, tal que ($Y^* \subset Y$) com m objetos que são selecionados de maneira aleatória; um conjunto, denominado A possuindo m objetos construídos artificialmente com valores aleatórios no espaço de cada uma das p-dimensões. Após a apresentação dos conjuntos de objetos utilizados, devem ser apresentadas as distâncias utilizadas, sendo elas a distância entre um objeto $y^* \in Y^*$ até o objeto de $Y - \{y^*\}$ mais próximo, denominada w_j; a distância entre um objeto $a \in A$ até o objeto mais próximo em Y, denominada u_j.

O valor da estatística Hopkins é obtido pela Equação 4.85. NAZARETH (2020) explica que para cada objeto, são consideradas as distâncias w_j e u_j. Busca-se a valores de H distantes de 0,5, cujo valor pertence ao intervalo $[0; 1]$. Em uma instância em que objetos estão em grupos bem definidos, coesos e bem separados, a distância média entre os objetos é pequena. Nesse caso o somatório de w_j tende a ser próximo de 0. Já em instâncias em que os objetos

estão dispersos no espaço, os somatórios de w_j e u_j são próximos, ou seja, o valor de H é próximo a 0,5. A estatística Hopkins é obtida pela Equação 4.85.

$$H = \frac{\sum_{j=1}^{m} u_j}{\sum_{j=1}^{m} w_j + \sum_{j=1}^{m} u_j} \quad (4.85)$$

Considerando o processo de formação de grupos como uma otimização da homogeneidade das amostras intragrupos e heterogeneidade das amostras intergrupos, testes estatísticos devem ser aplicados para confirmação desta heterogeneidade. Neste ponto verifica-se o quão heterogêneos os grupos são. A técnica que amplamente utilizada para verificação da distinção entre os grupos é a análise de variância multivariada, denominada MANOVA.

A MANOVA é um teste utilizado para comparar vetores de médias. Os dados normalmente são provenientes de delineamentos estatísticos. De acordo com JOHNSON & WICHERN (2018) a formulação de um teste estatístico para comparar vetores de médias, depende da partição do total da variância em: variância devido ao efeito de tratamentos e variância devido ao erro.

Dentre os testes da MANOVA destacam-se o teste de Pillai (estatística traço de Pillai), Lawley-Hotelling (estatística = Traço Lawley-Hotelling), o teste de Wilk (estatística = Lambda de Wilk) e o teste da maior raiz de Roy. A interpretação de cada teste será apresentada em sequência:

De acordo com NAZARETH (2020) para o teste de Pillai, tem-se que maiores valores para a estatística do teste indicam a existência de diferenças estatisticamente significativas entre os grupos. É o melhor teste a ser usado na maioria das situações. A interpretação do valor da estatística para o teste de Lawley-Hotelling é de que quanto maior for a estatística do teste, maior será a diferença entre os grupos. Para o teste de Wilk quanto maior for a semelhança entre os grupos, mais próximo de 1 será a estatística, ou seja, para agrupamentos distintos o valor deve tender a 0. Para o teste maior raiz de Roy têm-se que os maiores valores para a estatística do teste também indicam a existência de diferenças estatisticamente significativas entre os grupos (NAZARETH, 2020).

A hipótese nula H_0 para os testes da MANOVA indicam a igualdade das populações, assim busca-se a rejeição da hipótese nula para que os agrupamentos sejam distintos. O *p-valor* indica o nível de significância destes testes, ou seja, a probabilidade de

rejeitar a hipótese nula quando ela é verdadeira. O *p-valor* é o menor nível de significância para o qual se rejeita a hipótese nula. Assim, como exemplo a hipótese nula é rejeitada a 5% de significância (ou 95% de confiança) quando o *p-valor* é menor que 5% (NAZARETH, 2020).

5. Metodologia

5.1. Considerações iniciais

Em uma visualização mais ampla pode-se dizer que o presente trabalho foi elaborado em quatro etapas distintas. A primeira etapa constitui de um estudo exploratório do banco de dados com as análises preliminares e o pré-processamento nos dados. A segunda etapa teve como objetivo a seleção das variáveis para a pesquisa, por meio da aplicação da análise fatorial.

As etapas seguintes foram realizadas utilizando as variáveis selecionadas provenientes da segunda etapa da pesquisa. Assim, a terceira e quarta etapas foram as construções dos modelos de classificação por meio dos métodos de aprendizagem supervisionada e não-supervisionada, respectivamente.

Cada etapa desta pesquisa foi contemplada de estudos preliminares verificando a adequabilidade dos dados, objetivos das técnicas, e validações dos resultados obtidos. A Tabela 5.1 resume as etapas descritas ressaltando objetivos e técnicas aplicadas.

Tabela 5.1 - Resumo dos objetivos e técnicas aplicadas em cada etapa da pesquisa.

Etapas	Objetivos	Técnicas
1ª Etapa	Estudo exploratório do banco de dados; Análises preliminares; Pré-processamento nos dados.	Organização e compilação do banco de dados.
		Determinação da classificação RMR para cada amostra do banco de dados.
		Categorização (criação dos pesos) das variáveis do banco de dados
		Teste de esfericidade de Bartlett
		Teste KMO e MSA
2ª Etapa	Seleção das variáveis	Análise Fatorial
3ª Etapa	Construção e validação dos modelos de classificação por meio de aprendizagem supervisionada	Redes neurais artificiais (ANN)
		Random Forest (RF)
		Naïve Bayes (NB)
		Máquina de vetores de suporte (SVM)
4ª Etapa	Construção e validação dos modelos de classificação por	*Partitioning Around Medoids* (PAM) e em sequência árvores de decisão (DT)

	meio de aprendizagem não-supervisionada	

5.2. Materiais

O banco de dados utilizado nesta pesquisa é resultado de uma compilação de diferentes bancos de dados de minas brasileiras. O banco é constituído de pontos amostrais com variáveis levantadas ao longo das faces de taludes, contendo informações sobre parâmetros relacionados à classificação RMR, são 3216 amostras. Assim, para a construção dos modelos de classificação por aprendizagem supervisionada, as classes do RMR para cada ponto foram utilizadas. A Tabela 5.2 apresenta oito amostras do banco de dados inicial da pesquisa. A Tabela 5.3 apresenta a nomenclatura destas variáveis.

Tabela 5.2 - Cabeçalho do banco de dados inicial.

Id	R	W	CD1	CD2	CD3	CD4	CD5	PA	Classe do RMR
16	5	5	3	3	5	4	5	1	Classe II
250	1	1	3	2	3	2	2	1	Classe III
670	3	5	3	3	1	3	5	5	Classe II
800	6	5	5	2	3	1	2	1	Classe I
1500	1	2	1	1	1	3	1	1	Classe V
2590	1	2	2	5	1	2	1	1	Classe IV
35	6	6	3	5	2	4	5	5	Classe I
122	2	2	3	3	2	3	2	5	Classe III

Tabela 5.3 - Nomenclatura aplicada as variáveis do banco de dados inicial

Nomenclatura	Variável
R	Resistência da rocha intacta
W	Alteração do maciço
CD1	Espaçamento
CD2	Persistência
CD3	Abertura
CD4	Rugosidade
CD5	Preenchimento
PA	Presença de água

O RMR determinado para cada amostra do banco de dados foi o RMR básico de acordo com Bieniawski (1989), onde não foi considerada a correção para orientação das descontinuidades.

O *software* utilizado para aplicação de toda metodologia foi o R versão 3.3.1 (R Core Team 2018). Todos os scripts aplicados, para cada técnica estão disponíveis nos Apêndices deste trabalho.

5.3. Pré-processamento e análises preliminares

Os maiores processos de pré-processamento aplicados na presente pesquisa foram a categorização das variáveis do banco de dados e o balanceamento das classes RMR das amostras do banco de dados. Importante ressaltar que especificamente o balanceamento das classes foi realizado apenas para a construção dos modelos de classificação por aprendizagem supervisionada. Por se tratar de um processo supervisionado, o desbalanceamento nas classes poderia enviesar os classificadores propostos.

O primeiro processo de pré-processamento no banco de dados foi a categorização, criação dos pesos para as variáveis, que pode ser compreendido como uma adaptação das variáveis originais a um conjunto de variáveis categorizadas. Isso foi necessário porque o banco de dados original é composto por variáveis qualitativas e quantitativas. Além disso, é comum na prática dos sistemas de classificação de maciços rochosos a criação destes pesos para as variáveis, tais como os sistemas RMR, Q de Barton, RMi, entre outros.

Para a aplicação das técnicas as variáveis qualitativas foram categorizadas com valores de 1 a 5, sendo 1 a pior situação em relação à qualidade do maciço (rocha de má qualidade) e 5 a melhor situação (rocha de boa qualidade).

A variável resistência da rocha intacta foi medida usando o teste do martelo do geólogo, e foi categorizada de acordo com ISRM (1981), com valores variando de 0 a 6. A variável alteração do maciço rochoso foi avaliada de acordo com os graus de alteração propostos pela ISRM (1981), com valores que variam de 1 a 6. A variável relativa a água foi registrada em campo de forma qualitativa, ou seja, relatando a presença ou não de água em cada ponto. Portanto, para a situação seca, o valor 5 foi assumido, e para a presença de água, o valor 1 foi assumido. A Tabela 5.4 apresenta as variáveis e seus valores utilizados para a fase inicial da pesquisa, resultado da metodologia aplicada de categorização.

Tabela 5.4 - Sistema de pesos aplicados para as variáveis.

Propriedades da rocha intacta							
Resistência	R0	R1	R2	R3	R4	R5	R6
Peso	0	1	2	3	4	5	6
Alteração	W1	W2	W3	W4	W5	W6	
Peso	6	5	4	3	2	1	
Propriedades das descontinuidades							
Espaçamento	> 2 m	0.6 a 2 m	0.2 a 0.6 m	60 a 200 mm	< 60 mm		
Peso	5	4	3	2	1		
Persistência	< 1 m	1 a 3 m	3 a 10 m	10 a 20 m	> 20 m		
Peso	5	4	3	2	1		
Abertura	Ausência	< 0.1 mm	0.1 a 1 mm	1 a 5 mm	> 5 mm		
Peso	5	4	3	2	1		
Rugosidade	Polida	Lisa	Levemente rugosa	Rugosa	Muito rugosa		
Peso	1	2	3	4	5		
Preenchimento	Macio > 5 mm	Macio < 5 mm Duro > 5 mm	Macio > 5 mm Duro < 5 mm	Duro < 5 mm	Ausência		
Peso	1	2	3	4	5		
Presença de água	Molhado			Seco			
Peso	1			5			

A variável RQD não foi utilizada, pois existe relação matemática direta com a variável espaçamento de descontinuidade. Posto isso, diferentes modelos foram testados com as duas variáveis citadas buscando aquela que permitiu uma melhor interpretação dos resultados. Nos estudos estatísticos é importante não utilizar variáveis que possam ter variância comum, evitando resultados enviesados em relação a qualquer variável. Além disso, alguns pontos podem ser apontados: o espaçamento das descontinuidades é uma variável obtida diretamente em campo; o RQD é uma variável que apresenta limitações, por exemplo, ela depende da direção dos furos, podendo resultar em interpretações errôneas sobre o fraturamento do maciço. Posto isso, a variável espaçamento foi a adotada.

Em relação ao processo de balanceamento das classes RMR foi utilizado o algoritmo Smote, proposto por CHAWLA *et al.* (2002). O Smote é um dos algoritmos mais aplicados para corrigir problemas com classificação desbalanceada. A ideia geral desse método é gerar artificialmente novos exemplos da classe minoritária por reamostragem. Além disso, os

exemplos da maioria das classes também são subamostrados, levando a um conjunto de dados mais equilibrado, permitindo que o treinamento esteja livre de qualquer viés amostral.

A proposta do Smote é simples e eficiente, como mostrado nos estudos de CHAWLA *et al.* (2002) e HA & BUNKE (1997). A técnica aborda o problema de balanceamento de dados com várias possibilidades, tais como a "sub-amostragem" ou "super-amostragem". O processo se dá a partir da criação de exemplos "sintéticos", sendo que no final as classes do banco de dados vão estar balanceadas.

Todo problema de balanceamento apresenta dois caminhos: a superamostragem das classes minoritárias ou a subamostragem das classes majoritárias.

Para explicação do método aplicado, considera-se um problema de classe minoritária, no qual optou-se por superamostrar a classe minoritária, o processo de balanceamento pelo Smote pega cada amostra de classe minoritária e introduz exemplos sintéticos ao longo dos segmentos de linha que unem quaisquer vizinhos mais próximos desta classe minoritária. Este processo acontece no espaço dimensional das variáveis (*espaço de características*). Dependendo da quantidade de superamostragem necessária, os vizinhos dos vizinhos mais conhecidos são escolhidos aleatoriamente. A implementação atual encontrou o número de cinco vizinhos como o ótimo. O processo de subamostragem segue o mesmo raciocínio.

As amostras "sintéticas" são geradas da seguinte maneira: 1) cálculo da diferença entre o vetor de características (amostra) em consideração e seu vizinho mais próximo; 2) multiplique essa diferença por um número aleatório entre 0 e 1 e adicione-o ao vetor de característica em consideração.

Em relação aos testes de adequação de amostra para uma análise fatorial, os testes de Bartlett e de adequação de amostra devem ser aplicados. A justificativa está no fato de que para uma análise fatorial as variáveis devem ter correlações significativas, assim, o teste de esfericidade de Bartlett (BTS) permite verificar a presença de correlações significativas entre as variáveis. Já os testes para medir a adequação da amostra são o KMO e MSA, que verificaram a adequação do conjunto de dados e de cada variável separadamente. Assim, os fatores foram formados com variáveis que contribuem para o modelo, retirando aquelas com MSA menor que 0,50.

Uma adequação da amostra aplicada especificamente para a construção do modelo de classificação por redes neurais artificiais é recomendada pela literatura. Se trata da transformação das variáveis categóricas em variáveis *dummies*. As variáveis *dummies* podem

ser utilizadas como entradas em métodos de regressão tradicionais e modelos preditivos, como o caso das redes neurais artificiais. O uso de *dummies* é indicado em modelos com variáveis qualitativas, devido ao uso de atributos (faixas ou pesos) utilizados nas categorias. Neste contexto, o uso de variáveis *dummies* minimiza os impactos dos atributos escolhidos. Além disso, em variáveis categóricas, o uso de *dummies* reduz possíveis modelos enviesados em relação a uma variável específica.

De acordo com GARAVAGLIA & SHARMA (1998) em aplicações de redes neurais artificiais, a informação representativa expressa como vetores de variáveis *dummies* expande a seleção de paradigmas na estrutura das redes. A vantagem do uso de *dummies* é o aumento do número de neurônios na camada de entrada e nas camadas ocultas, permitindo graus de liberdade suficientes para um grande número de unidades ocultas. Isso fornece melhor desempenho das redes neurais porque as unidades ocultas podem "modelar" diferentes regiões complexas do espaço de dados.

5.4. Partição do banco de dados

Para o treinamento dos modelos, o conjunto de dados foi particionado em amostra de treinamento e teste de forma aleatória. A amostra de treinamento consistiu em 2/3 do banco de dados e a amostra de teste com o 1/3 restante, de acordo com HAIR *et al*. (2009). Apenas a amostra de treino foi utilizada para treinamento do modelo.

Além disso, buscando os melhores ajustes e cenários possíveis foi aplicada a técnica de *random subsampling*. A *random subsampling* foi feita com trinta seleções, ou seja, trinta modelos foram treinados para cada algoritmo de aprendizado de máquina. Cada modelo consistia em uma amostra de treinamento diferente. O processo de *random subsampling* foi aplicado com o objetivo de verificar a reprodutibilidade dos resultados, estabilidade do modelo e estatísticas básicas das métricas de avaliação, como intervalos de confiança, média, mínimo, máximo e variabilidade dos resultados.

5.5. Aplicação das técnicas

A primeira técnica aplicada foi a análise fatorial que possibilitou a identificação e rotulação de fatores comuns relacionados à qualidade do maciço rochoso. Depois disso, as variáveis selecionadas a partir dos fatores rotulados constituíram um novo banco de dados, com uma dimensionalidade menor que a original, haja vista que algumas variáveis foram retiradas.

Em seguida, algoritmos de aprendizado de máquina foram aplicados para classificar os dados por aprendizagem supervisionada e não-supervisionada. Para a aprendizagem supervisionada os algoritmos aplicados foram Naive Bayes (NB), Random Forest (RF), Redes Neurais Artificiais (ANN) e as Máquinas de Vetores de Suporte (SVM). Para a aprendizagem não-supervisionada o algoritmo de agrupamento PAM foi aplicado.

Considerando a aprendizagem supervisionada é importante ressaltar que as classes de RMR servem apenas como guia para calibrar a classificação proposta, pois o modelo preditivo é composto por um número menor de variáveis, selecionadas pela análise fatorial, que o diferencia do sistema de classificação de RMR. O objetivo da aplicação dos diferentes algoritmos, no caso da aprendizagem supervisionada, é o de avaliar o desempenho e comparar as técnicas.

5.5.1. Identificação dos fatores comuns

A análise fatorial foi aplicada para a identificação de fatores comuns relacionados à qualidade dos maciços rochosos. O pacote no R utilizado foi psych (REVELLE, 2020). A extração dos fatores comuns foi realizada pelo método dos componentes principais com posterior rotação dos fatores pelo método ortogonal varimax. A seleção do número de fatores foi feita pelo critério de Kaiser (KAISER, 1958), mantendo os fatores cujos autovalores são maiores que 1,0, ou seja, mantém-se no mínimo a variância explicada de uma variável original utilizada no modelo. Posto isso, a otimização do modelo de fatores baseou-se na interpretabilidade dos fatores e seleção das variáveis de acordo com a sua adequação (KMO/MSA) e explicação no modelo (comunalidades). A Figura 5.2 apresenta a metodologia utilizada durante a análise fatorial.

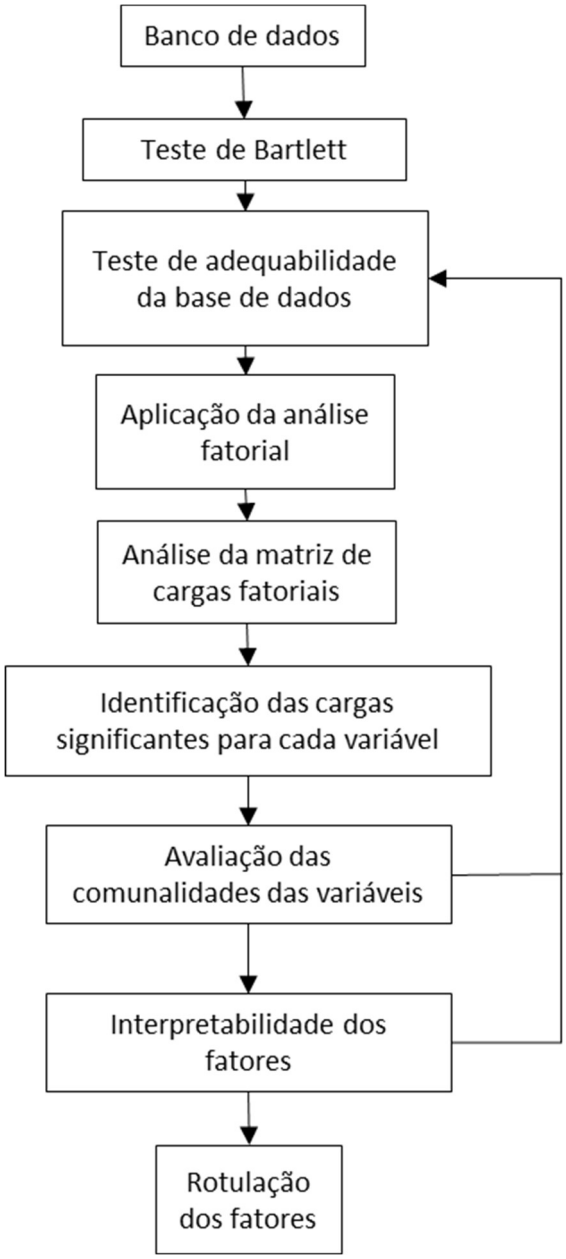


Figura 5.1 - Metodologia para avaliação da análise fatorial.

A partir da Figura 5.1 são observadas as etapas da análise fatorial, ficando claro que se trata de uma metodologia cíclica. No caso de um resultado não viável nas etapas de avaliação das comunalidades das variáveis e/ou na etapa de interpretabilidade dos fatores, considera-se a retirada das variáveis "problemáticas" e assim a modelagem fatorial volta a etapa de adequabilidade da base de dados (KMO/MAS). Este estudo específico pode ser interpretado como um processo de otimização do modelo fatorial. A solução ótima é a apresentada.

5.5.2. Treinamento dos modelos de classificação

Para treinamento dos modelos de aprendizado de máquina, foram utilizados pacotes específicos do R. O pacote e1071 (MEYER *et al.*, 2012) foi utilizado para otimizar o treinamento para as técnicas de SVM e NB. O pacote randomForest (LIAW & WIENER, 2002) foi utilizado para treinar o modelo para a técnica de RF. O pacote neuralnet (GÜNTHER & FRITSCH, 2010) foi usado para treinar o modelo para a técnica de RNA. O pacote stats foi utilizado para construção dos *clusters* por PAM.

Para selecionar os parâmetros de cada técnica no treinamento dos modelos, foram aplicados ajustes e recomendações da literatura. Além disso, todos os parâmetros ajustados para o treinamento dos modelos foram selecionados com base no desempenho do modelo (*tunning*), ou seja, os parâmetros foram testados e selecionados de acordo com o melhor desempenho do modelo.

Para o treinamento com a técnica NB, o parâmetro de ajuste é a correção de Laplace, que não foi necessária para o presente estudo. A correção de Laplace não foi necessária devido à aplicação do Smote que visa equilibrar as classes. Além disso, o método de partição utilizado garante que a amostra de treinamento e teste estejam equilibradas em relação ao número de exemplos de cada classe de forma proporcional tanto na amostra de treinamento quanto na amostra de teste. Assim, a proporção de classes na amostra de treinamento e teste foi equivalente. Posto isso, o parâmetro de correção de Laplace foi 0.

Para o treinamento do RF dois parâmetros são importantes no ajuste do modelo: o número de árvores (n_{tree}); e o número de variáveis amostradas aleatoriamente como candidatas em cada nó (m_{try}). O n_{tree} não deve ser um número muito pequeno, para garantir que cada variável seja prevista pelo menos algumas vezes. O m_{try} foi selecionado de acordo com as recomendações da literatura para problemas de classificação; $m_{try} = 2$, ver Equação 4.58 (LIAW & WIENER, 2002). Para ajustar o n_{tree}, vários valores foram testados procurando o valor mínimo para a precisão máxima. Dentre os valores testados, observou-se que a partir de $n_{tree} = 100$ houve uma estabilização do valor de acurácia do modelo. Valores acima de 100 não adicionaram ganho no desempenho do modelo e aumentaram o custo computacional. Então $n_{tree} = 100$ foi assumido.

Para o treinamento da ANN o método utilizado foi a rede neural *perceptron* multicamadas com aprendizado supervisionado por meio do algoritmo *resiliente backpropagation*, com uma camada intermediária e função de ativação tangente hiperbólica.

Vale ressaltar que diferentes funções de ativação foram testadas, sendo que a função tangente hiperbólica apresentou os melhores resultados. A função tangente hiperbólica aproxima-se da identidade, variando os valores de 1 a -1, proporcionando os melhores resultados para o treinamento da rede; portanto, foi a escolha adequada para a função de ativação.

Com relação à estrutura da rede neural, a camada de entrada possui 24 neurônios, que são equivalentes às variáveis *dummies*. Em relação aos princípios sobre o número de neurônios na camada intermediária e para evitar problemas de *underfitting* e *overfitting*, 25 neurônios foram usados na camada oculta. A camada de saída da rede possui 5 neurônios, equivalentes às classes RMR existentes no banco de dados, classe I, classe II, classe III, classe IV e classe V. A Figura 5.2 ilustra a estrutura aplicada para o treinamento da ANN.

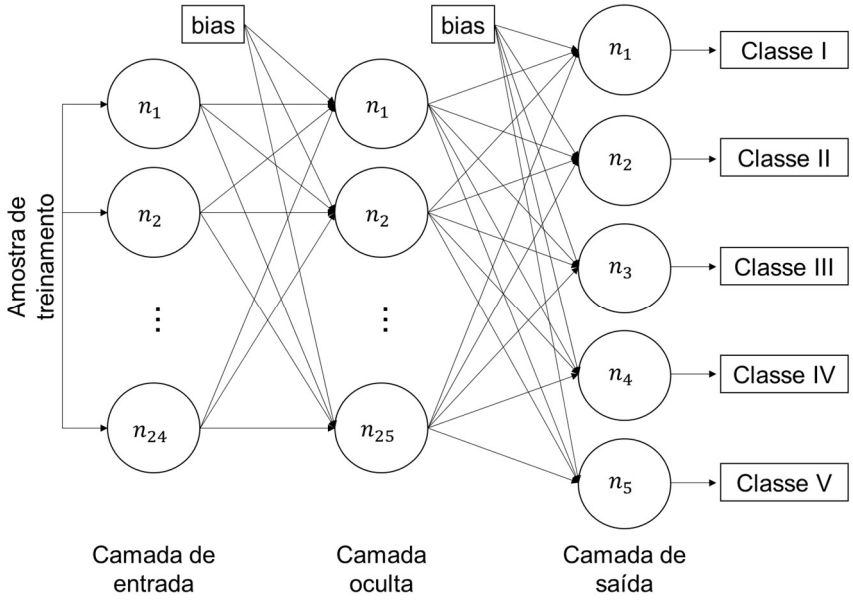


Figura 5.2 - Estrutura da ANN aplicada.

Para a construção do modelo de classificação por SVM o *tuning* também foi aplicado, buscando otimizar a função do kernel e seus parâmetros considerando o melhor desempenho do modelo. As funções linear, polinomial, radial e sigmoide foram testadas para o kernel, com melhores resultados para a função radial. Assim, para o treinamento do SVM foi utilizado o kernel radial, com $(1/2\sigma^2) = 1$.

Para a classificação dos maciços por meio de aprendizagem não-supervisionada foi utilizado o algoritmo de clusterização PAM. O agrupamento foi aplicado nas variáveis selecionadas da análise fatorial, assim como na metodologia aplicada para os modelos

supervisionados. A seleção do número de grupos para formação foi feita com base nos métodos Elbow e da silhueta. Assim, foi estudado cada uma das possibilidades de agrupamento, aplicando o princípio da interpretabilidade dos grupos em conjunto com as métricas de validação dos agrupamentos. O número de 7 grupos foi o escolhido.

Um ponto importante para a classificação por aprendizagem não supervisionada foi a criação da variável $Pontuação$ (Equação 5.1). A variável $Pontuação$ é resultado do somatório dos pesos das variáveis para cada amostra do banco de dados em estudo. Assim, quanto maior o valor da variável $Pontuação$ melhor será o maciço. Esta metodologia do "somatório" pode ser equiparada a metodologia do RMR proposta por BIENIAWSKI (1989), porém, a variável *Pontuação* conta com um número menor de variáveis (que são aquelas selecionadas pela análise fatorial) e o sistema de pesos é distinto.

$$Pontuação = \sum_{i=1}^{n} P_i \qquad (5.1)$$

Na Equação 5.1, tem se que P_i é o valor (peso) da variável i e n é o número total de variáveis. Utilizando a variável *Pontuação* e a interpretação dos valores das variáveis de cada grupo formado, foi possível hierarquizar os grupos construídos.

Outro ponto importante acerca da variável $Pontuação$, foi a verificação da sua relação com o valor do RMR de cada ponto amostrado. Foi observado o comportamento entre as duas variáveis, por meio do coeficiente de correlação e retas de ajuste entre as duas variáveis.

Uma última técnica aplicada nesta pesquisa foi a árvore de decisão. A técnica foi aplicada a partir do resultado do modelo de classificação por aprendizagem não supervisionada. Assim, a partir das variáveis obtidas pela análise fatorial foi ajustada uma árvore de decisão com os grupos obtidos do modelo de classificação por aprendizagem não supervisionada. Além deste resultado permitir uma visualização da relação dos grupos formados com as variáveis, possibilita também a utilização futura para classificação de novos maciços para o modelo proposto pelo PAM.

5.5.3. Validação dos modelos propostos

Considerando os modelos por aprendizagem supervisionada, trinta modelos foram treinados com diferentes amostras de treinamento e validados com suas respectivas amostras

de teste. Assim, a partir dos 30 modelos treinados foram obtidos os valores médios para as métricas de avaliação do modelo vistas na seção 4.6 no Capítulo 4.

Posto isso, as métricas de acurácia com seus respectivos intervalos de confiança (Equação 4.89), índice Kappa (Equação 4.97), eficiência (Equação 4.94), precisão (Equação 4.92) e índice AUC foram aplicados e avaliados.

Para validação do modelo por aprendizagem não-supervisionada foram utilizados métodos internos e externos. Dentre os métodos internos destacam-se estatística Hopkins, que verifica a tendência de agrupamento do banco de dados, o teste estatístico MANOVA que verifica se os *clusters* são realmente grupos distintos e por fim as ferramentas de visualização para verificar a formação dos *clusters*. Já como métodos externos buscou-se a interpretabilidade dos *clusters* formados verificando a distribuição dos valores das variáveis presentes em cada *cluster*. Além disso, foi realizada a verificação da relação da variável $Pontuação$ (Equação 5.1) com os *clusters*, o que permitiu a hierarquização dos *clusters*.

6. Resultados e discussões

6.1. Considerações iniciais

O sistema de classificação RMR (BIENIAWSKI, 1989) foi utilizado nesta pesquisa como ponto de partida, com justificativas que serão aqui explicadas nas considerações iniciais por ser de extrema importância. O sistema de classificação RMR é amplamente aceito e aplicado em estudos da mecânica de rochas, por vários motivos já explicados no Capítulo 4, item 4.2.3. Assim, para a construção dos modelos via métodos supervisionados a classe predeterminada do RMR foi utilizada. Porém, é importante salientar que os sistemas de classificação aqui propostos são diferentes do RMR, pois, consideram um grupo menor de variáveis e um sistema de pontuação para cada variável.

Posto isso, os modelos de classificação que serão apresentados em sequência foram obtidos por um número menor de variáveis e com um sistema de categorização diferente do que foi proposto por BIENIAWSKI (1989). Assim, a semelhança entre os sistemas aqui propostos é basicamente a qualidade final no maciço, haja vista que se utilizou as classes do RMR para o rótulo final.

Já no método não supervisionado o RMR não foi utilizado em momento algum da criação do sistema. Porém, observou-se que o índice obtido nesta parte da pesquisa, variável denominada $Pontuação$, apresentou uma correlação interessante com o valor do RMR, assim, estudou-se essa correlação considerando a importância já mencionada da classificação RMR.

6.2. Pré-processamento e análises preliminares

6.2.1. Determinação da classificação RMR

A partir da pontuação referente a cada variável do banco de dados, o valor do RMR foi determinado para cada ponto do banco de dados. Esta aplicação permitiu entender o comportamento e a distribuição das classes de maciço rochoso no conjunto de dados. Assim, para os métodos supervisionados a classe do RMR foi utilizada como rótulo inicial para o treinamento das técnicas aplicadas. A Figura 6.1 apresenta a distribuição das classes do RMR no banco de dados em estudo. No Apêndice A desta tese está apresentada a estatística completa do banco de dados.

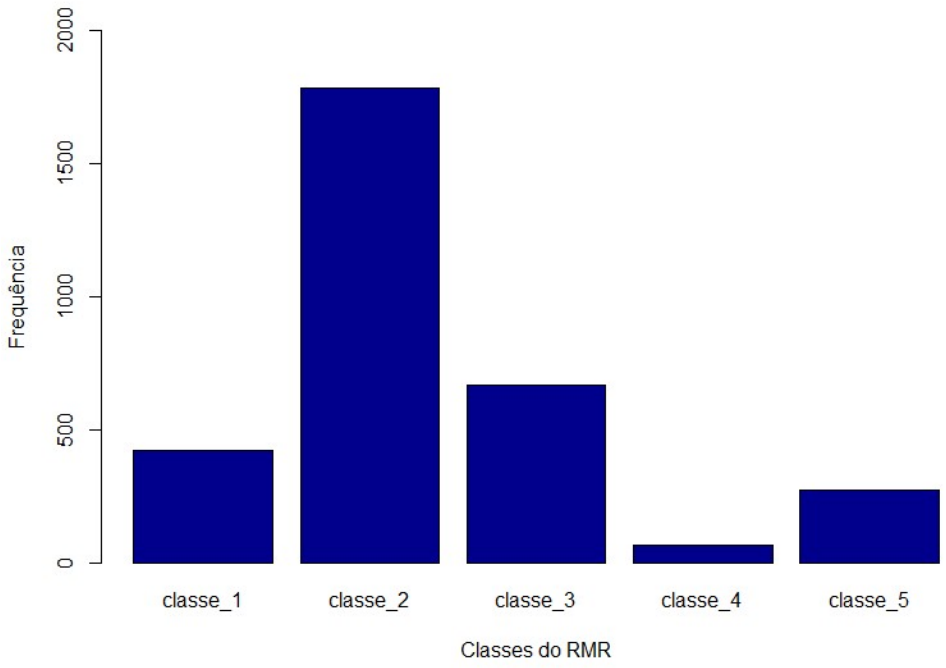


Figura 6.1 - Gráfico de barras para a classificação RMR.

A partir da Figura 6.1 é possível perceber o desbalanceamento de classes no banco de dados, com a Classe II predominante. Assim, para evitar problemas de modelos enviesados criados pelos métodos supervisionados um balanceamento por reamostragem foi aplicado ao banco de dados. A técnica aplicada foi o Smote que reduz a classe predominante e aumenta as classes com menor amostragem. Assim, para as técnicas supervisionadas o banco foi distribuído de acordo com a Figura 6.2.

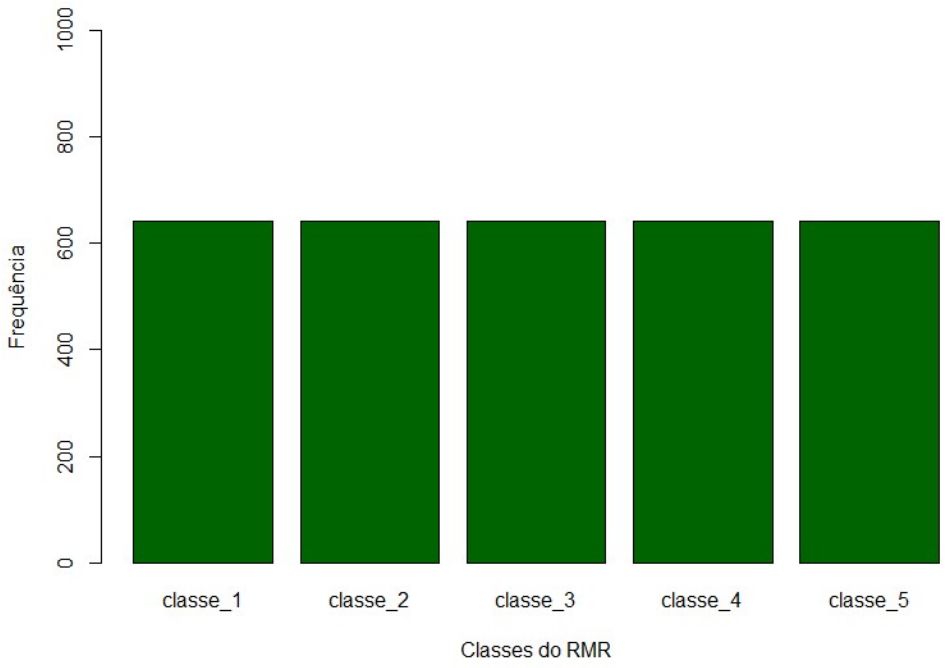


Figura 6.2 - Distribuição das classes RMR após a correção do desbalanceamento.

6.2.2. Teste de esfericidade de Bartlett

As análises preliminares foram realizadas para verificar a adequabilidade do banco de dados ao conjunto de técnicas propostas, em suma a metodologia aplicada. A técnica de análise fatorial seleciona variáveis por meio da rotulação de fatores comuns, que são formados por variáveis que apresentam variância em comum. Assim, é recomendado para aplicação da técnica a presença de correlações significativas. Para isso, aplicou-se o teste de esfericidade de Bartlett que verifica a presença de correlações significativas suficientes entre as variáveis. A Tabela 6.1 apresenta o resultado do teste de esfericidade de Bartlett.

Tabela 6.1 - Resultados do teste de esfericidade de Bartlett.

Parâmetro estatístico	Valor
x^2	10690
df	45
$p - valor$	$< 2{,}2\,x10^{-16}$

Considerando o valor para o p-valor do teste de Bartlett, próximo de zero, a hipótese nula $H0\ (R = I)$ é rejeitada, assim, existe correlação suficiente entre variáveis para aplicação de técnica de análise fatorial.

6.3. Identificação dos fatores comuns

A análise fatorial foi aplicada ao banco de dados com o objetivo de identificação de fatores comuns ao banco de dados relacionados a qualidade do maciço rochoso. Logo, foi ajustada uma análise fatorial de acordo com os objetivos da pesquisa, visando o princípio de interpretabilidade em conjunto com a adequabilidade e as comunalidades das variáveis.

Assim, o modelo final da análise fatorial foi obtido a partir da avaliação dos resultados do teste KMO/MSA, em seguida a verificação da comunalidade e especificidade de cada variável, e ao final a avaliação da matriz de cargas fatoriais visando a interpretação dos fatores. Posto isso, as variáveis selecionadas para a análise fatorial foram a resistência da rocha intacta, presença de água e alteração do maciço rochoso e em relação as descontinuidades o espaçamento, abertura e persistência.

Os resultados do teste de adequabilidade da amostra apresentaram valores regulares a bom, KMO de 0,50 e MSA para cada variável apresentados na Tabela 6.2. O presente resultado de adequabilidade pode estar relacionado a dimensão do banco de dados, uma vez que são cerca de 3300 amostras para um número de 5 variáveis qualitativas e 1 variável quantitativa. Apesar do resultado ser considerado regular, este não inviabiliza a prática da análise fatorial.

Tabela 6.2 - Resultados do KMO/MSA.

Variável	MSA	Interpretação
Resistência	0,50	Regular
Alteração	0,50	Regular
Espaçamento	0,60	Bom
Persistência	0,50	Regular
Abertura	0,60	Bom
Água	0,50	Regular

A determinação do número de fatores foi feita por meio do Critério de KAISER (1958), com resultado de três fatores. A Figura 6.3 apresenta o *screeplot* para aplicação do Critério de KAISER (1958) na determinação do número de fatores.

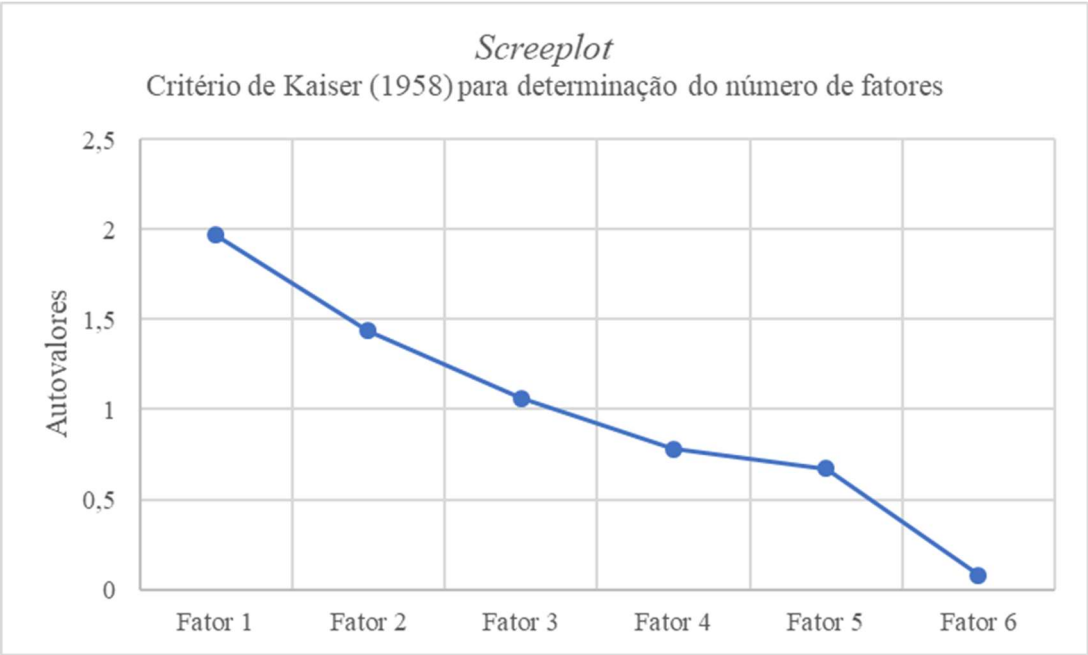


Figura 6.3 - Screeplot para aplicação do Critério de KAISER (1958).

A extração dos fatores foi realizada por meio das componentes principais com posterior rotação dos fatores pelo método ortogonal varimax. Assim, a primeira análise do modelo fatorial foi realizada nos valores das comunalidades e especificidades das variáveis, apresentadas na Tabela 6.3. Os altos valores de comunalidade retratam o poder de explicação do modelo em função de cada variável. Já a especificidade mostra o que o modelo não consegue explicar. Dentre os valores apresentados a variável abertura é a variável que o modelo explica em menor proporção.

Tabela 6.3 - Comunalidades e especificidades das variáveis.

Variável	Comunalidade	Especificidade
Resistência	0,95	0,05
Alteração	0,95	0,05
Espaçamento	0,77	0,23

Persistência	0,68	0,32
Abertura	0,50	0,50
Água	0,62	0,38

A Tabela 6.4 apresenta as cargas fatoriais para cada variável em relação aos fatores, com a rotação pelo método varimax para melhor definição e interpretação dos fatores.

Tabela 6.4 - Matriz de cargas fatoriais rotacionada.

Variável	Fator 1	Fator 2	Fator 3
Resistência	0,973		
Alteração	-0,974		
Espaçamento	-0,164	0,291	0,809
Persistência	-0,136	0,502	-0,642
Abertura		-0,706	
Água		-0,776	

Os resultados obtidos pelas cargas fatoriais indicaram o Fator 1 representando as variáveis resistência e alteração da rocha, o Fator 3 representando as variáveis espaçamento e persistência, e o Fator 2 representando as variáveis água e abertura entre as descontinuidades. Todas as variáveis estão diretamente relacionadas a qualidade dos maciços rochosos.

Aplicando o princípio da interpretabilidade, tem-se no Fator 1, um fator relacionado com a competência da rocha, uma vez que nele existe a resistência da rocha intacta e a alteração. Estes parâmetros estão relacionados uma vez que a alteração no maciço impacta diretamente a resistência deste. O Fator 3 apresenta relação direta com o grau de fraturamento do maciço rochoso, uma vez que apresenta as variáveis espaçamento e persistência das descontinuidades. Por último, o Fator 2 está relacionado com as condições de percolação de água no maciço rochoso, uma vez que o fator relaciona a presença de água com a abertura das descontinuidades. Assim, a Tabela 6.5 apresenta a rotulação final dos fatores.

Além disso o sinal dos fatores também reforça a premissa dos rótulos indicados, no caso do Fator 1, resistência e alteração, e Fator 2, espaçamento e persistência, as variáveis apresentam sinais opostos, o que reflete a realidade. Estas variáveis são inversamente proporcionais e isso fica representado nos fatores, por exemplo, quanto menor o espaçamento

e maior a persistência maior será o grau de fraturamento no maciço rochoso, o contrário também se verifica, quanto maior o espaçamento e menor a persistência, menor será o grau de fraturamento no maciço rochoso.

Tabela 6.5 - Rotulação dos fatores.

Variável	Fator	Rótulo
Resistência	Fator 1	Grau de resistência e alteração do maciço rochoso
Alteração		
Espaçamento	Fator 3	Grau de fraturamento do maciço rochoso
Persistência		
Abertura	Fator 2	Condições de percolação de água no maciço rochoso
Água		

A partir do resultado do processo de identificação dos fatores comuns foi possível reduzir a dimensionalidade do banco de dados original, retirando todas as variáveis que não foram identificadas nos fatores apresentados. Assim, basicamente um novo banco de dados foi obtido, formado apenas pelas variáveis identificados nos fatores. A Figura 6.4 ilustra o resultado da primeira parte da pesquisa, a seleção das variáveis pelo método da análise fatorial com a posterior rotulação dos fatores encontrados.

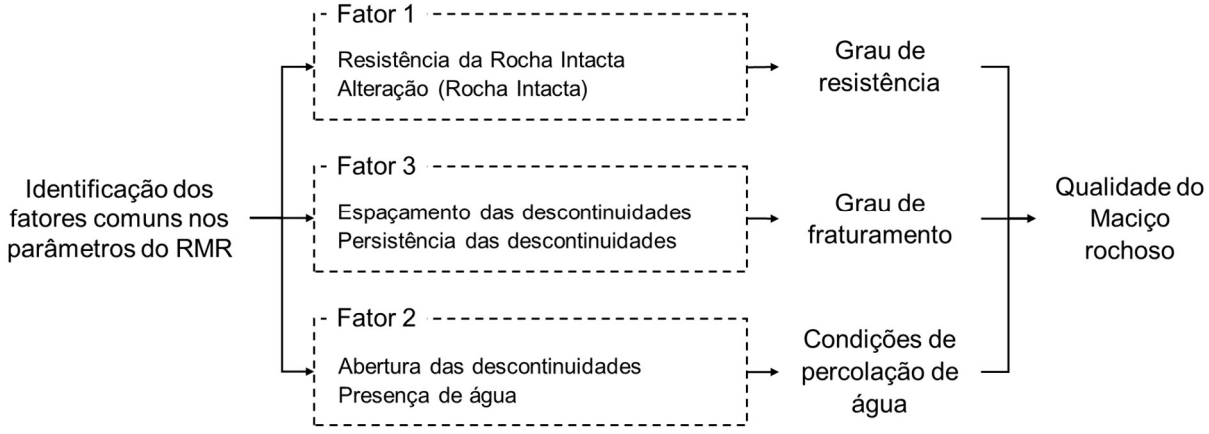


Figura 6.4 – Resultado da análise fatorial.

6.4. Modelos de classificação por aprendizagem supervisionada

6.4.1. Treinamento dos modelos

Para o treinamento dos modelos de aprendizado de máquina, foram utilizadas as variáveis selecionadas a partir dos fatores rotulados, resultado da análise fatorial. Assim, o banco de dados de treinamento foi composto pela resistência e alteração do maciço rochoso, espaçamento, persistência e abertura das descontinuidades, além da presença de água.

Os modelos de classificação por aprendizagem supervisionada utilizados foram naive Bayes (NB), random forest (RF), redes neurais artificiais (ANN) e máquinas de vetores de suporte (SVM). Como explicado no Capítulo 5, os ajustes dos parâmetros para os modelos foram feitos com base em recomendações literárias e com base no desempenho do modelo, então considera-se as aplicações com o *tunning*. Os modelos foram treinados trinta vezes com a aplicação do *random subsampling*.

A primeira verificação dos modelos treinados foi o desempenho nas amostras de treinamento e teste, para observar a existência de problemas de *overfitting* e *underfitting*. A métrica de desempenho do modelo para verificação de *overfitting* e *underfitting* foi a acurácia, ou seja, a probabilidade geral de sucesso, em cada treinamento realizado. Nas Figuras 6.5 a 6.8 estão apresentados os desempenhos nas amostras de treino e teste para cada técnica, ANN, RF, NB e SVM, respectivamente.

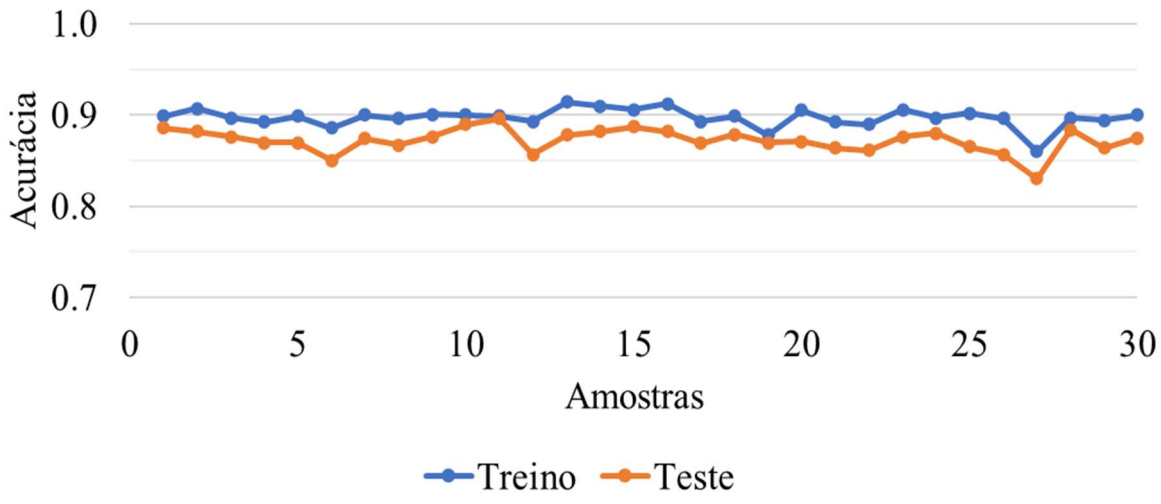


Figura 6.5 - Desempenho nas amostras de treino e teste para o modelo de ANN.

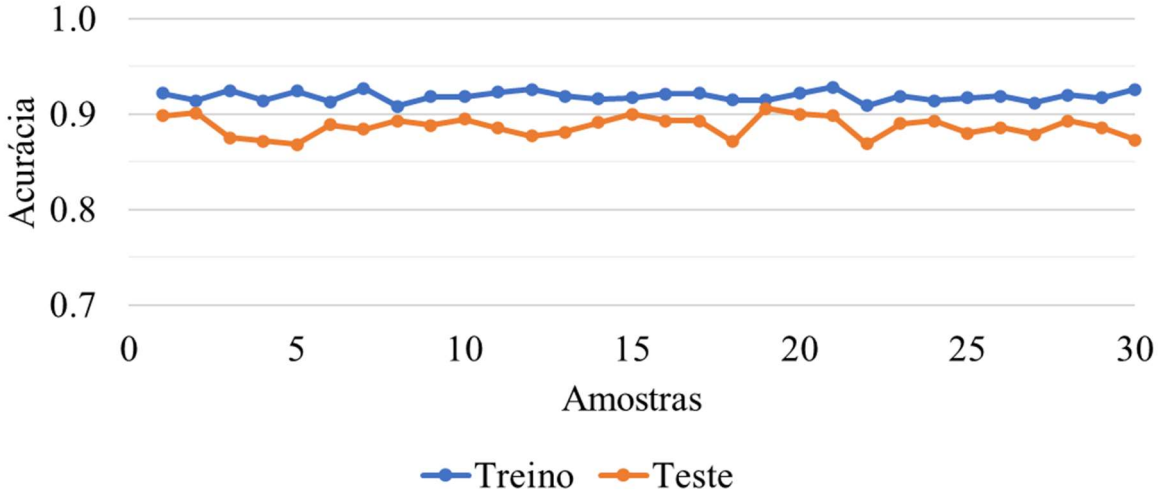


Figura 6.6 - Desempenho nas amostras de treino e teste para o modelo de RF.

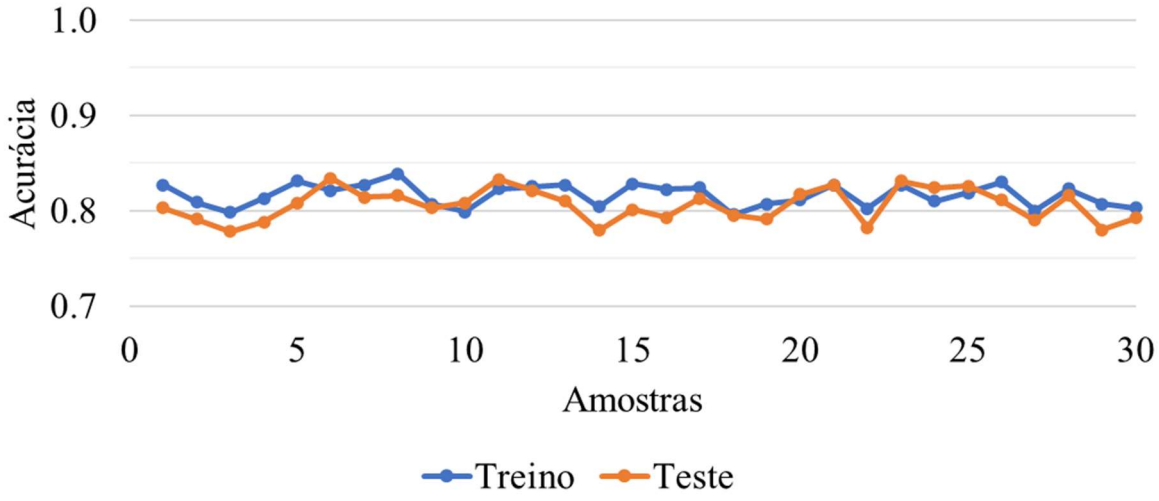


Figura 6.7 - Desempenho nas amostras de treino e teste para o modelo de NB.

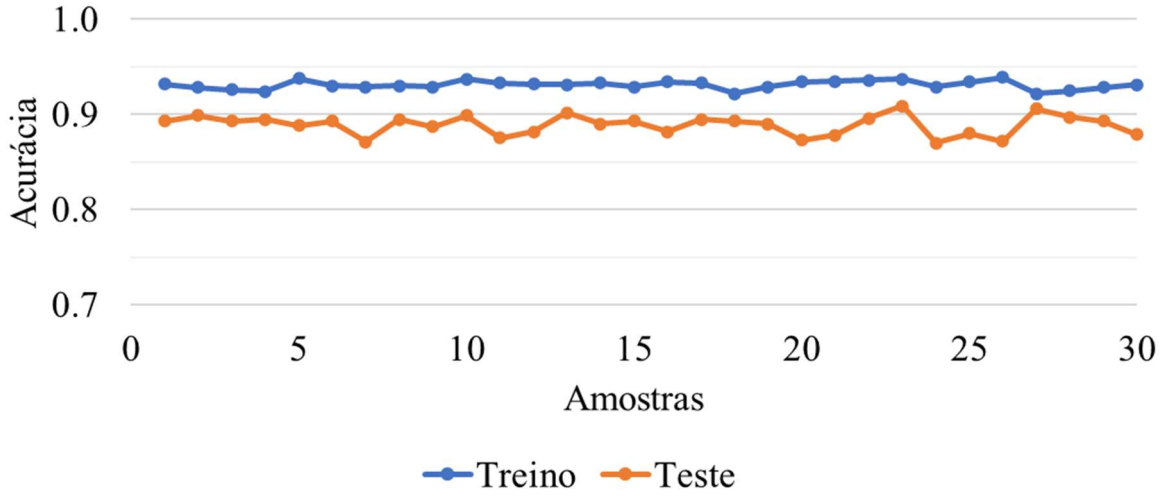


Figura 6.8 - Desempenho nas amostras de treino e teste para o modelo de SVM.

O *underfitting* ocorre quando o desempenho do modelo não é satisfatório, considerando as amostras de treinamento e teste. Valores baixos significam que os modelos não são recomendados. Nas Figuras 6.5 a 6.8, todos os modelos apresentaram alta acurácia, sem *underfitting*, o que mostra a recomendação de seu uso.

O *overfitting* ocorre quando o aprendizado do modelo é memorizado e funciona bem apenas na amostra de treinamento, com valores ineficientes na amostra de teste. O *overfitting* pode ser diagnosticado a partir de diferenças significativas entre o desempenho do modelo nas amostras de treinamento e teste. A partir das Figuras 6.5 a 6.8, é possível observar uma semelhança entre os desempenhos no treinamento e teste, o que descarta problemas de *overfitting* nos modelos.

Os resultados apresentados nas 6.5 a 6.8 são importantes, pois além de evidenciar a ausência de problemas de *overfitting* e *underfitting*, é possível visualizar a adequação dos modelos solução de classificação dos maciços rochosos. Os algoritmos utilizados apresentam bons resultados para a classificação do maciço rochoso, principalmente considerando o uso de um número menor de variáveis quando comparado ao RMR tradicional. Isso mostra a sincronia do presente estudo, pois a redução do tamanho do banco de dados por meio da seleção das variáveis realmente relacionadas à qualidade do maciço rochoso é validada, pois é possível chegar às classificações por meio de diferentes algoritmos de aprendizado de máquina.

6.4.2. Validação dos modelos

Uma visualização das médias da acurácia dos modelos, que representa a probabilidade geral de sucesso, com seus respectivos intervalos de confiança superior e inferior está apresentada na Figura 6.9.

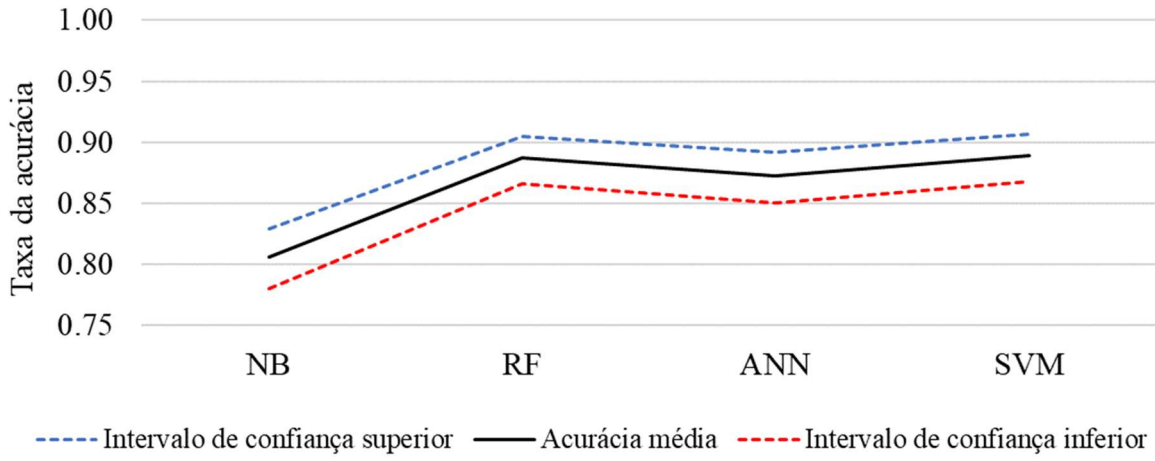


Figura 6.9 - Acurácia média dos modelos com intervalos de confiança.

Na Figura 6.9 os valores médios de acurácia dos modelos foram 0,81, 0,89, 0,87 e 0,89 para NB, RF, ANN e SVM, respectivamente. A acurácia representa o número de respostas corretas em relação ao total de dados na amostra de teste. Dito isso, as taxas de erro são 0,19 (NB), 0,13 (ANN) e 0,11 (RF e SVM). Assim, é possível verificar que todos os modelos apresentam desempenho satisfatório, sendo o NB o menor valor.

Dentre os algoritmos aplicados o que apresenta menor grau de complexidade, ou seja, o mais simples é o NB. Acredita-se que a simplicidade do algoritmo possa ter impactado no menor valor de acurácia. Embora, o valor de acurácia do NB seja o menor, 81%, isso não significa que modelo deva ser descartado. Este estudo apenas mostra que existem algoritmos com melhor taxa de desempenho. Outro ponto a ser citado é que a literatura indica que a premissa da interdependência entre os preditores pode impactar no resultado do NB, o que pode ser reafirmado aqui neste estudo.

Apesar disso, ao se considerar a complexidade da classificação dos maciços rochosos, por se tratar de um problema de várias classes, com 5 classes distintas, o que eleva o grau de dificuldade do problema, o resultado de precisão de 0,81 para o NB é considerado satisfatório e pode ser aplicado.

Em relação aos maiores valores de acurácia, sejam eles RF, ANN e SVM, alguns pontos devem ser comentados. O modelo da ANN com o algoritmo Rprop e a aplicação de variáveis *dummies* potencializam os resultados, possibilitando melhor relação (interação) entre os neurônios nas camadas. A sofisticação do método SVM, principalmente devido ao aumento da dimensionalidade para ajuste do hiperplano durante o treinamento do algoritmo, implica em bons resultados. O RF funciona como um método de *ensemble* para árvores de decisão, ou seja, várias árvores são treinadas, o que contribui para a melhoria dos resultados. Nenhum dos modelos apresentou resultados que inviabilizassem seu uso, porém o RF, a ANN e a SVM foram destacados.

Para avaliar a reprodutibilidade dos resultados obtidos, foram analisados o índice Kappa e a área sob a curva ROC (AUC). As curvas ROC não foram plotadas por haver muita sobreposição entre as curvas do modelo e não apresentar a melhor visualização. Assim, optou-se pelos valores abaixo da curva em forma de tabela e gráfico. Posto isso, a Tabela 6.6 apresenta os resultados do índice Kappa e AUC.

Tabela 6.6 - Valores do Índice Kappa e AUC para os modelos.

Modelo	Índice Kappa	AUC
NB	0,76	0,95
RF	0,86	0,96
ANN	0,84	0,96
SVM	0,86	0,96

O valor AUC aponta para o comportamento não aleatório dos modelos treinados. A avaliação do índice Kappa permite interpretar o NB como concordância substancial e outros como concordância quase perfeita. A partir dos resultados dos índices, verifica-se a reprodutibilidade dos modelos.

Os resultados da análise fatorial reduziram o número de variáveis, o que torna o banco de dados diferente das variáveis RMR originais, e mesmo assim, os algoritmos de aprendizado de máquina conseguiram obter as classes RMR com precisão. Assim, acredita-se na consistência e racionalidade da metodologia proposta. A metodologia proposta é uma abordagem que funciona para o problema de classificação de maciços rochosos.

Para o estudo em questão, se tratando de 5 classes de classificação a avaliação do desempenho dos modelos em relação a cada classe foi realizada utilizando as métricas de eficiência e precisão. Essas métricas são interessantes para observar o comportamento dos classificadores em relação a cada classe, identificando os pontos fortes e fracos. A eficiência se reflete em uma acurácia balanceada, sendo uma média que entre sensibilidade e especificidade. A precisão mostra a taxa de acerto de previsão para cada classe. As Figuras 6.10 e 6.11 apresentam os resultados para eficiência e precisão de cada classe para os modelos treinados.

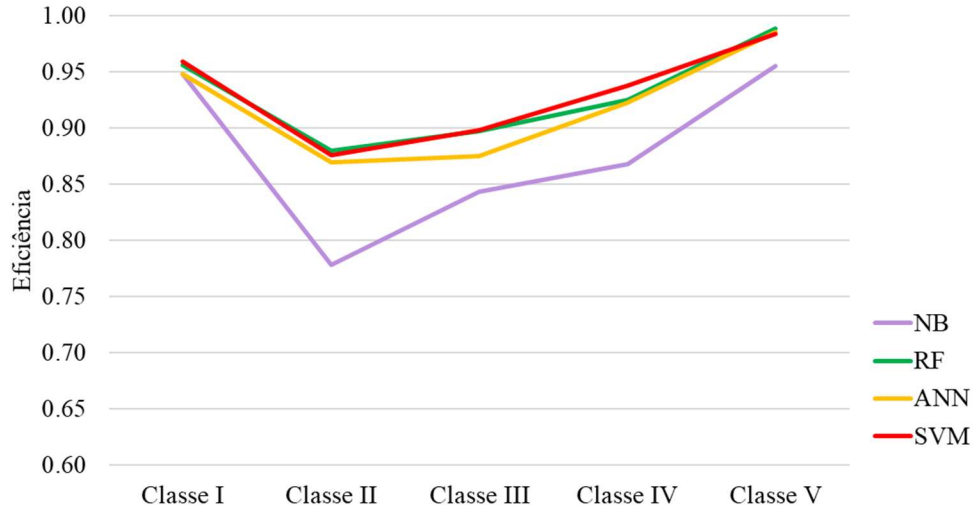


Figura 6.10 - Eficiência das classes.

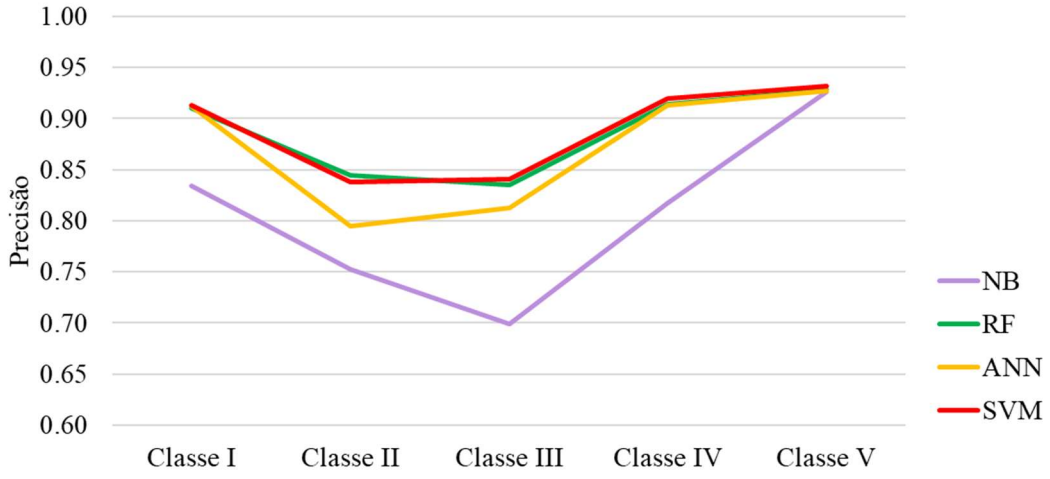


Figura 6.11 - Precisão das classes.

De acordo com as Figuras 6.10 e 6.11, existe uma similaridade de desempenho entre os modelos RF, ANN e SVM. O NB apresentou, em média, valores menores quando comparado aos demais modelos, o que reflete no menor resultado de acurácia geral do modelo, conforme mostrado na Figura 6.9.

A característica geral observada nesse resultado é a predominância dos melhores valores para as métricas em classes extremas, por exemplo, o caso da Classe I e Classe V. Este resultado é esperado uma vez que essas classes são muito bem definidas, a Classe I é a rocha muito boa e a Classe V é a rocha muito pobre. Assim, os menores valores das métricas encontram-se nas Classes II, III e IV, o que pode ser interpretado como uma zona de transição entre as classes no problema em estudo. Acredita-se, que as características que definem as classes I e V são bem determinadas, particulares, para o maciço rochoso. Os valores das métricas são mostrados na Tabela 6.7.

Tabela 6.7 - Valores para eficiência e precisão de cada classe.

Métrica	Eficiência				Precisão			
Classes	NB	RF	ANN	SVM	NB	RF	ANN	SVM
Classe I	0.95	0.96	0.95	0.96	0.83	0.91	0.91	0.91
Classe II	0.78	0.88	0.87	0.88	0.75	0.84	0.79	0.84
Classe III	0.84	0.90	0.88	0.90	0.70	0.83	0.81	0.84
Classe IV	0.87	0.92	0.92	0.94	0.82	0.91	0.91	0.92
Classe V	0.96	0.99	0.99	0.98	0.93	0.93	0.93	0.93

De acordo com a Tabela 6.7, em relação à eficiência, o menor valor registrado foi de 0,78 para a classe II no modelo NB, atingindo valores máximos de 0,99 para algumas classes em diversos modelos. Os valores de alta eficiência refletem o poder dos modelos treinados para a abordagem do problema. Os menores valores estão na precisão, especificamente no modelo NB, chegando a um valor mínimo de 0,70 para a classe III.

Os modelos treinados apresentaram desempenho significativo para solucionar o problema de classificação do maciço rochoso. As melhores métricas para o desempenho geral do modelo e desempenho da classe foram RF, ANN e SVM. Embora o NB tenha um desempenho inferior, os resultados obtidos não excluem a possibilidade de utilização do algoritmo para problemas de classificação de maciços.

Em relação aos modelos com melhores taxas de desempenho, destaca-se o ANN, por ser um modelo com menor complexidade em termos de compreensão, visualização e concepção do algoritmo quando comparados aos modelos de RF e SVM. De fato, pela literatura, os modelos de ANN foram os primeiros modelos propostos para a inteligência artificial.

6.4.3. Verificação do impacto no desempenho dos modelos com inserção das variáveis preenchimento e rugosidade das descontinuidades

Uma forma de avaliar o resultado da análise fatorial na seleção das variáveis para classificação do maciço foi realizar novamente o treinamento dos modelos propostos com inserção de duas variáveis relacionadas a descontinuidade sempre presente em levantamentos de campo com vistas a avaliação de maciços rochosos. As duas variáveis reintegradas para avaliação foram o preenchimento e rugosidade das descontinuidades. Essas variáveis foram retiradas da análise durante a avaliação do modelo fatorial proposto. Assim, realizou-se 10 treinamentos com a inserção das "novas variáveis" ao banco de dados. A Tabela 6.8 apresenta a acurácia média dos modelos para os dois diferentes bancos de dados.

Tabela 6.8 - Diferença dos modelos com inserção das variáveis rugosidade e persistência.

Modelo	Acurácia do modelo média (*Random subsampling com 10 amostras aleatórias*)		
	Banco com preenchimento e rugosidade	Banco sem preenchimento e rugosidade	Diferença
ANN	0.899	0.876	0.023
RF	0.916	0.890	0.026
NB	0.839	0.813	0.027
SVM	0.921	0.889	0.032
Diferença média			0.027

A partir da Tabela 6.8 é possível perceber que os modelos no treinamento obtiveram diferenças pouco discrepantes, com média de 0,027. Posto isso, considerando que o ganho de informação do modelo devido a inserção das duas variáveis chega ao valor de 0.33 (o banco passa a contar com 8 variáveis ao invés de apenas 6), os ganhos de treinamento do modelo são pequenos, irrelevantes, quando comparado ao ganho de informação. Para os sistemas clássicos de classificação estas variáveis se fazem necessárias para se obter a classe do maciço, porém

aqui se mostra por meio do aprendizado de máquina que estas não são de alta relevância para se obter as classes dos maciços.

As duas variáveis retiradas, preenchimento e rugosidade são relacionadas diretamente às descontinuidades, demandando tempo e técnica de levantamento, e é sabido que estes levantamentos devem ocorrer ao longo de toda a vida útil de uma mina. Assim, considerando o custo operacional para levantamento destas duas variáveis em campo, de fato o aumento de desempenho do modelo não é significante. Esta comparação pode ser compreendida como uma forma de validação do resultado da seleção da análise fatorial indicando que as variáveis retiradas impactam pouco para a classificação do maciço rochoso.

Acredita-se que esse resultado se deve à natureza destas variáveis adicionadas estarem restritas à condição da descontinuidade, assim desempenhando um papel mais importante na caracterização das descontinuidades e não na qualidade do maciço rochoso. O que acontece de forma diferente na seleção da persistência e espaçamento das descontinuidades que desempenham um papel importante na qualidade do maciço rochoso, já que ambas definem o comportamento do maciço considerando o efeito escala, ou seja, comportamento próximo ou distante de um meio contínuo equivalente. Posto isso, tem-se na Tabela 6.8 um resultado importante que reforça a seleção das variáveis a partir da análise fatorial.

Aqui o que se pretende estabelecer é uma discussão acerca da importância dos parâmetros geomecânicos na classificação do maciço rochoso. De fato, o maciço rochoso é um conjunto de blocos de "rocha intacta" separados por descontinuidades, logo a classificação do maciço rochoso deve abranger características da rocha intacta e das descontinuidades. Porém, estes resultados mostram que não é necessária a concepção de todos os parâmetros existentes para se alcançar determinada classificação, pode-se chegar a classificação por meio de um número menor de variáveis, e isso é explanado aqui com a união dos resultados da análise fatorial e o treinamento de modelos de classificação.

6.5. Modelo de classificação por aprendizagem não supervisionada

6.5.1. Pré-análise e determinação do número de grupos

A classificação por meio de aprendizagem não-supervisionada foi construída pelo método PAM. O primeiro teste estatístico aplicado aos dados foi a estatística Hopkins, que verifica se os dados são agrupáveis ou não agrupáveis. O valor da estatística Hopkins foi de 0,33 um valor médio que indica a possibilidade de clusterização do banco de dados.

Para visualizar a clusterização do banco de dados foi plotado o mapa de calor da estatística Hopkins, apresentado na Figura 6.12. Na Figura 6.12 os valores da estatística em cor vermelha indicam que os dados originais são diferentes dos dados aleatórios, conceito do teste de Hopkins, ou seja, os grupos formados por elas são significativos. Em uma análise inicial, a interpretação da imagem indica a formação aproximada de 7 grupos em destaque.

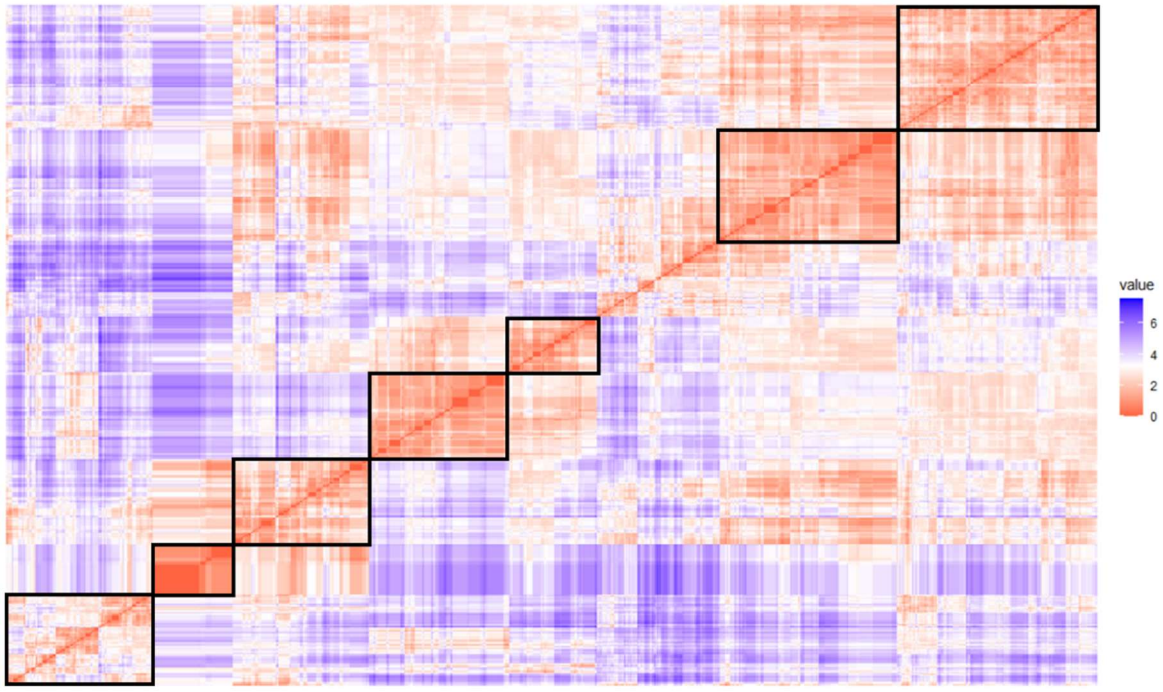


Figura 6.12 - Mapa de calor das distâncias entre as amostras.

A partir daí a sequência do estudo foi a determinação do número ótimo de grupos. A determinação do número de grupos foi realizada por meio do método da silhueta em conjunto com método de Elbow. Os resultados estão apresentados nas Figuras 6.13 e 6.14.

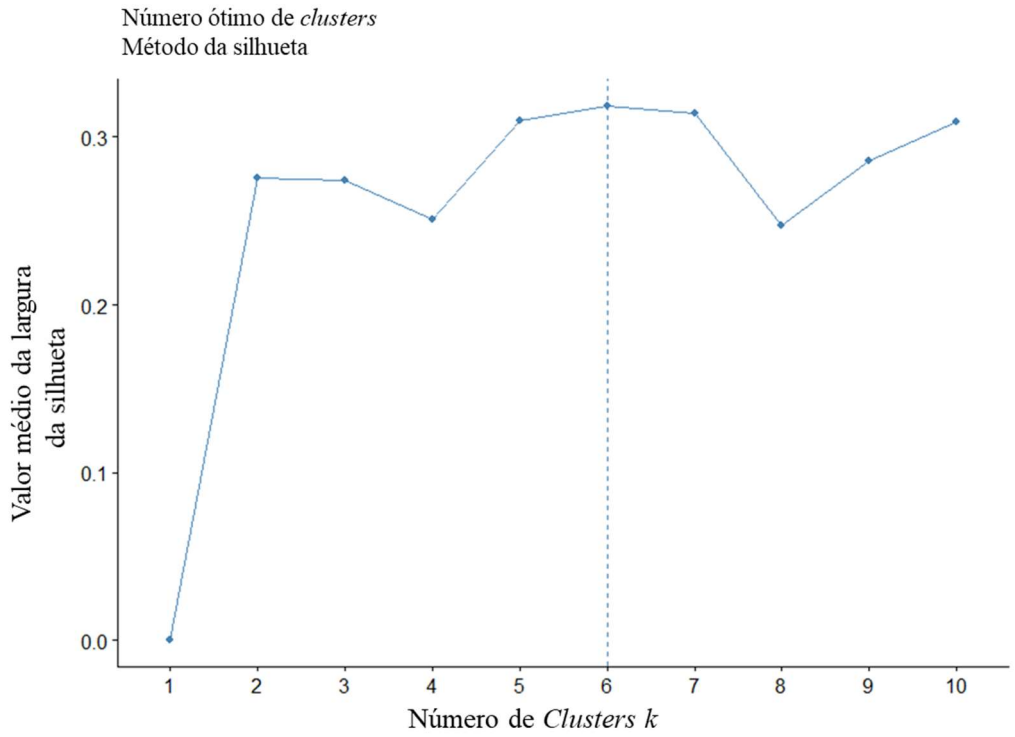


Figura 6.13 - Resultado da seleção do número de grupos pelo método da silhueta.

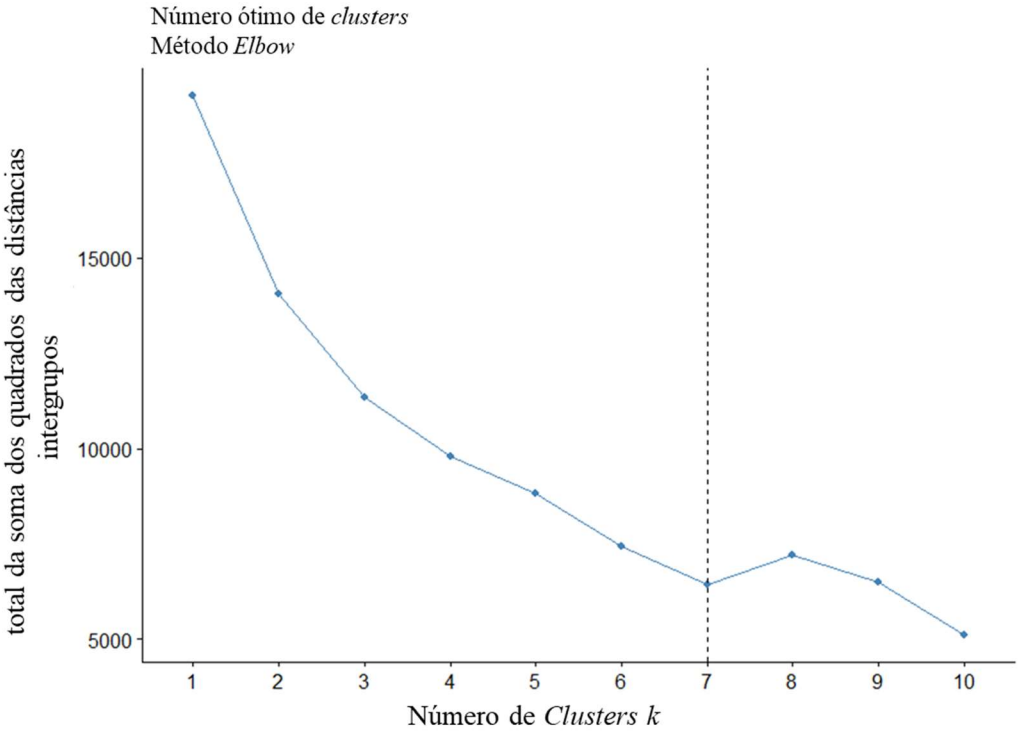


Figura 6.14 - Resultado da seleção do número de grupos pelo método Elbow.

O método da silhueta (Figura 6.13) apresentou 6 grupos como valor máximo. Já o método Elbow (Figura 6.14) indica um número ótimo de 7 grupos. Pela silhueta é possível perceber que não existe diferença significativa para os números de 5, 6 e 7 grupos. Logo, realizou-se experimentos com as três possibilidades, e a escolha de 7 grupos foi a melhor opção baseando-se no princípio da interpretabilidade dos grupos.

6.5.2. Análise e validação dos agrupamentos

Assim realizou-se o agrupamento para 7 grupos por meio da técnica PAM. A Figura 6.15 apresenta o resultado da silhueta para cada amostra dentro de cada agrupamento formado. Embora a silhueta tenha apresentado um valor médio de cerca de 0,30; o que significa um agrupamento regular, existem vários pontos com valores que chegam a 0,8; além disso, são poucos os pontos com valor de silhueta negativa.

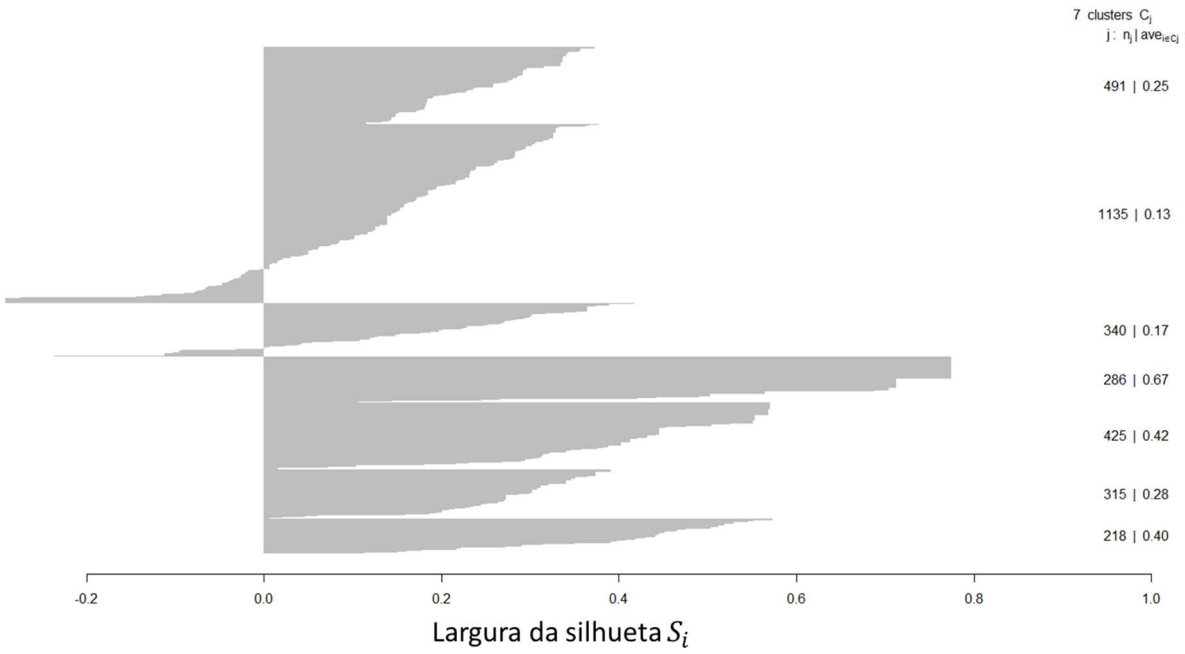


Figura 6.15 - Resultado do gráfico da silhueta.

Os agrupamentos foram validados pelos testes estatísticos da MANOVA, apresentados na Tabela 6.9. A partir dos resultados dos testes verifica-se que a hipótese nula é rejeitada a um nível de confiança de 99,9%, ou significância de 0,01; ou seja, os grupos formados são estatisticamente diferentes.

Tabela 6.9 - Testes da MANOVA – Ajuste Geral do Modelo.

Teste	Graus de Liberdade (GF)	Valor da Estatística	F aproximado	Num. GF	Den. GF	p-valor
Pillai	6	1,7917	298.13	30	16015	< 2,2e-16
Wilks	6	0.0472	488.27	30	12798	< 2,2e-16
Hotelling-Lawley	6	7.0668	753.18	30	15987	< 2,2e-16
Roy	6	5,5629	2969.6	6	3203	< 2,2e-16

6.5.3. Visualização dos agrupamentos

A visualização dos grupos formados foi feita por meio das 3 primeiras componentes principais, resultando em uma redução de dimensionalidade e compilação de um gráfico de 3 dimensões.

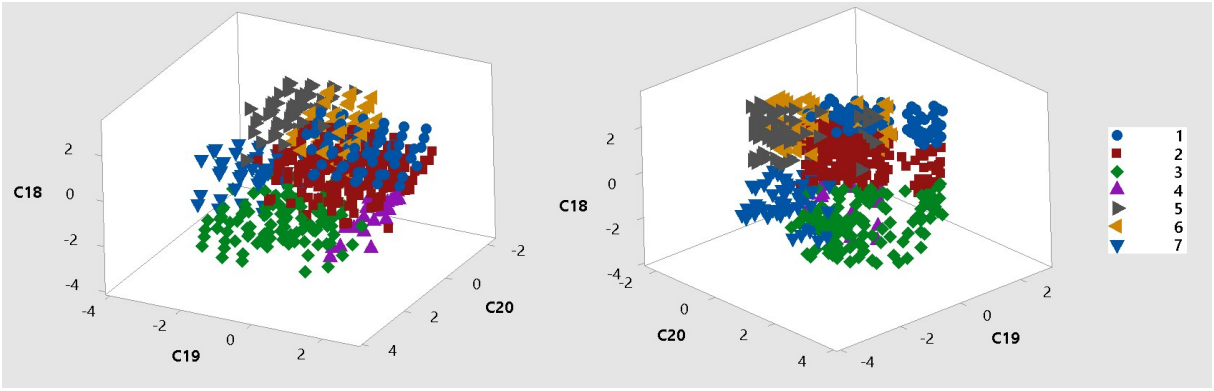


Figura 6.16 - Visualização dos grupos formados.

Na Figura 6.16 é possível visualizar a formação dos grupos, com certo grau de sobreposição. Em agrupamentos de dados reais, a depender da complexidade do problema, a sobreposição é normal, o que não pode acontecer é a maximização destas zonas e que não é observada na Figura 6.16. A sobreposição existe, porém, os grupos são bem definidos.

No contexto da pesquisa este grau de sobreposição já era esperado, pelo fato de que a análise de agrupamento que está sendo apresentada tem como objetivo avaliar a qualidade da rocha, o que é um problema complexo. A qualidade da rocha pode ser interpretada como um caráter de transição, dentro de cada grupo pode existir zonas de sobreposição.

Isso também fica claro nos modelos supervisionados, que apontam registros de erros apenas em classes vizinhas. De fato, o que define que uma amostra seja de um determinado grupo são suas multivariadas características que por sua vez também tem faixas de valores. Logo, existe uma faixa de transição entre as classes de rocha, e isto está exposto na Figura 6.16.

6.5.4. Interpretação dos agrupamentos

A interpretação dos grupos foi realizada por meio da estatística básica das variáveis em cada grupo. Foram avaliados o número de amostras de cada grupo (NA) os valores de média (MD), desvio padrão (DP), variância, valores mínimos (Mín.), primeiro quartil (Q1), mediana, terceiro quartil (Q3), valor máximo (Máx.), valor de moda e número de dados aquele valor de moda. Importante observar que a descrição é realizada de maneira geral observando todos os parâmetros e comparando-os grupo a grupo. É muito improvável neste tipo de descrição ter grupos com variáveis com totalmente distinto.

A Tabela 6.10 apresenta os valores utilizados para interpretação. Na Tabela 6.10, P1 é a variável resistência, P2 a variável alteração, P3 é o espaçamento, P4 é a persistência, P5 é a abertura e P6 é a presença de água. Estatística geral pode ser encontrada no Apêndice B.

Tabela 6.10 - Estatística descritiva de cada grupo.

Variável	Grupo	NA	MD	DP	Variância	Mín.	Q1	Mediana	Q3	Máx.	Moda	N. de moda
P1	1	491	5.88	0.32	0.10	5	6	6	6	6	6	433
P2			5.67	0.47	0.22	5	5	6	6	6	6	329
P3			3.25	0.66	0.44	2	3	3	4	5	3	272
P4			2.05	1.09	1.19	1	1	2	3	5	1	227
P5			3.05	1.45	2.10	1	2	3	5	5	5	145
P6			1	0	0	1	1	1	1	1	1	491
P1	2	1135	4.08	0.91	0.83	2	3	4	5	6	5	399
P2			4.61	0.62	0.38	2	4	5	5	6	5	736
P3			3.09	0.86	0.74	1	3	3	4	5	3	541
P4			1.87	1.08	1.16	1	1	1	3	5	1	632
P5			2.18	1.11	1.24	1	1	2	3	5	2	414
P6			1	0	0	1	1	1	1	1	1	1135
P1	3	340	1.28	0.96	0.91	0	0	1	2	3	2	119
P2			1.98	0.72	0.52	1	1	2	2	4	2	176
P3			3.64	0.74	0.54	2	3	4	4	5	4	172
P4			2.39	1.28	1.64	1	1	3	3	5	1	135
P5			2.40	1.34	1.79	1	1	2	3	5	2	135
P6			1	0	0	1	1	1	1	1	1	340

P1	4	286	1.48	0.68	0.46	0	1	1	2	3	1	149
P2			2.37	0.56	0.32	1	2	2	3	4	2	165
P3			1.13	0.34	0.12	1	1	1	1	2	1	248
P4			1.02	0.20	0.04	1	1	1	1	3	1	283
P5			1.17	0.55	0.30	1	1	1	1	5	1	258
P6			1	0	0	1	1	1	1	1	1	286
P1	5	425	5.06	0.59	0.35	3	5	5	5	6	5	292
P2			5.06	0.48	0.23	4	5	5	5	6	5	325
P3			3.56	0.77	0.59	2	3	4	4	5	4	202
P4			3.51	0.58	0.34	2	3	4	4	5	4	205
P5			1.66	0.90	0.82	1	1	2	2	5	1	211
P6			5	0	0	5	5	5	5	5	5	425
P1	6	315	4.96	0.84	0.71	3	4	5	6	6	5	151
P2			5.25	0.55	0.31	4	5	5	6	6	5	199
P3			3.40	0.89	0.79	2	3	3	4	5	3	165
P4			1.07	0.26	0.07	1	1	1	1	2	1	292
P5			1.90	1.33	1.78	1	1	1	2	5	1	174
P6			5	0	0	5	5	5	5	5	5	315
P1	7	218	2.05	0.67	0.45	1	2	2	2	3	2	120
P2			2.06	0.68	0.47	1	2	2	3	3	2	116
P3			3.59	1.02	1.04	2	3	4	4	5	3	74
P4			2.74	1.29	1.67	1	1	3	4	5	4	72
P5			1.73	0.55	0.31	1	1	2	2	3	2	136
P6			5	0	0	5	5	5	5	5	5	218

A avaliação foi orientada pelos valores da Tabela 6.10, pela qual foram avaliados os parâmetros. As variáveis resistência e alteração foram avaliadas em escala de “muito”, “médio” e “pouco”. As variáveis espaçamento, persistência e abertura foram analisadas em conjunto buscando aplicar uma interpretação sobre o grau de fraturamento do maciço, em escala de “muito”, “médio” e “pouco”.

A técnica de agrupamento PAM separou os grupos discriminando de maneira perfeita a variável água, ou seja, não houve mistura de maciços secos e molhados. Assim, a variável presença de água foi avaliada com o seguinte critério, “molhado” ou “seco”. A análise dos valores apresentados na Tabela 6.10 possibilitou a descrição de cada grupo que está apresentada na Tabela 6.11.

Tabela 6.11 - Descrição dos grupos formados.

Grupo	Descrição
1	Maciço com resistência alta, pouco alterado, com fraturamento médio. Molhado.
2	Maciço com resistência média, alteração média, com fraturamento médio. Molhado.
3	Maciço com resistência baixa, alteração alta, pouco fraturado. Molhado.
4	Maciço com resistência baixa, alteração alta, muito fraturado. Molhado.
5	Maciço com resistência alta, pouco alterado, pouco fraturado. Seco.
6	Maciço com resistência média, pouco alterado, com fraturamento médio. Seco.
7	Maciço com resistência baixa, muito alterado, pouco fraturado. Seco.

6.5.5. Criação da variável pontuação para hierarquização dos agrupamentos

Com intuito de hierarquizar os grupos formados foi criada a variável $Pontuação$ (Equação 5.1). Como explicado anteriormente a variável $Pontuação$ é resultado do somatório dos pesos das variáveis para cada amostra do banco de dados em estudo. Portanto, quanto maior o valor da variável $Pontuação$ melhor será o maciço.

Esta metodologia do "somatório" pode ser equiparada à metodologia do RMR proposta por Bieniawski (1973), porém, a variável $Pontuação$ conta com um número menor de variáveis (que são aquelas selecionadas pela análise fatorial) e o sistema de pesos é diferente.

Assim, foi calculada a variável $Pontuação$ para cada amostra do banco de dados e foi feito uma relação deste valor com os grupos formados. A Figura 6.17 apresenta os valores médios, com mínimos e máximos da variável $Pontuação$ para cada grupo formado.

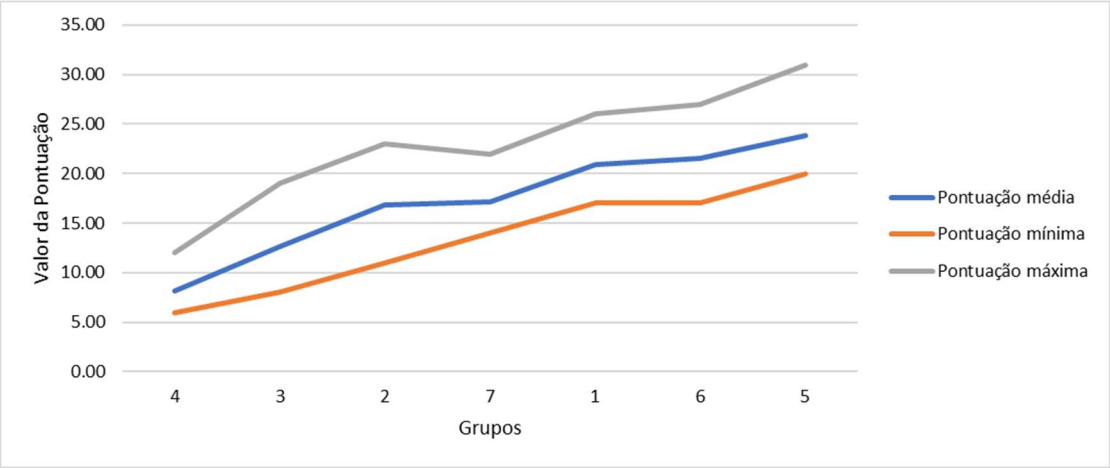


Figura 6.17 - Variável Pontuação para cada grupo formado.

Analisando a Figura 6.17 é possível observar uma hierarquia entre os grupos formados, o que reforça toda a metodologia aplicada. Assim, com o auxílio dos valores médios da variável *Pontuação* e a descrição dos grupos da Tabela 6.11 foi possível hierarquizar os grupos formados em classes de maciço rochoso. A presente pesquisa rotulou os grupos como classes de A à G, sendo a classe A representando maciços de melhor qualidade e a classe G representando maciços de pior qualidade. O resultado desta classificação está apresentado na Tabela 6.12.

Tabela 6.12 - Resultado da hierarquização dos grupos.

Classe	Descrição	Grupo	Valor médio da variável Pontuação
A	Maciço com resistência alta, pouco alterado, pouco fraturado. Seco.	5	23,85
B	Maciço com resistência média, pouco alterado, com fraturamento médio. Seco.	6	21,57
C	Maciço com resistência alta, pouco alterado, com fraturamento médio. Molhado.	1	20,90
D	Maciço com resistência baixa, muito alterado, pouco fraturado. Seco.	7	17,17
E	Maciço com resistência média, alteração média, com fraturamento médio. Molhado.	2	16,83
F	Maciço com resistência baixa, alteração alta, pouco fraturado. Molhado.	3	12,68
G	Maciço com resistência baixa, alteração alta, muito fraturado. Molhado.	4	8,17

Partindo do princípio da construção do sistema de classificação RMR, onde são estabelecidas faixas para os valores das classes a presente pesquisa apresenta as faixas para as classes propostas. Nas Figuras 6.18 a 6.21 estão apresentados os boxplots e distribuições para a variável Pontuação nas classes estabelecidas. A análise foi feita para as duas condições de água, maciço seco e maciço com presença de água, haja vista que o agrupamento separou estes grupos perfeitamente. Uma pequena faixa de sobreposição é observada nos extremos das distribuições, porém no intervalo entre 1° quartil e 3° quartil esta sobreposição é mínima. Portanto as faixas de classes aqui propostas serão com base nos valores dos quantis.

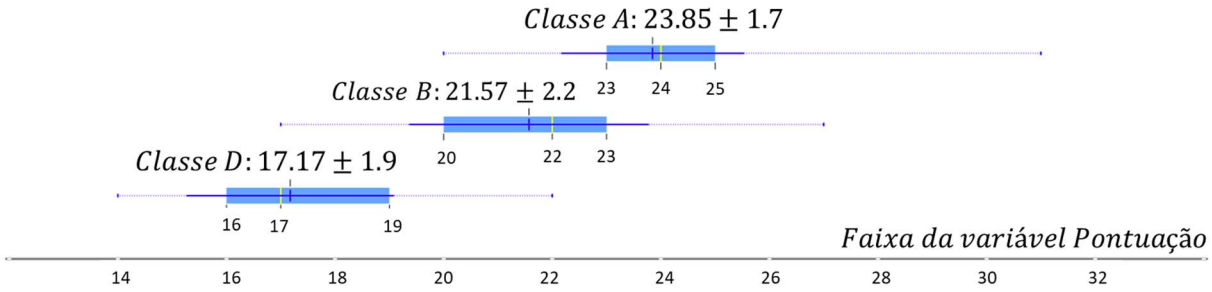


Figura 6.18 - Faixas de valores para classes considerando maciço seco.

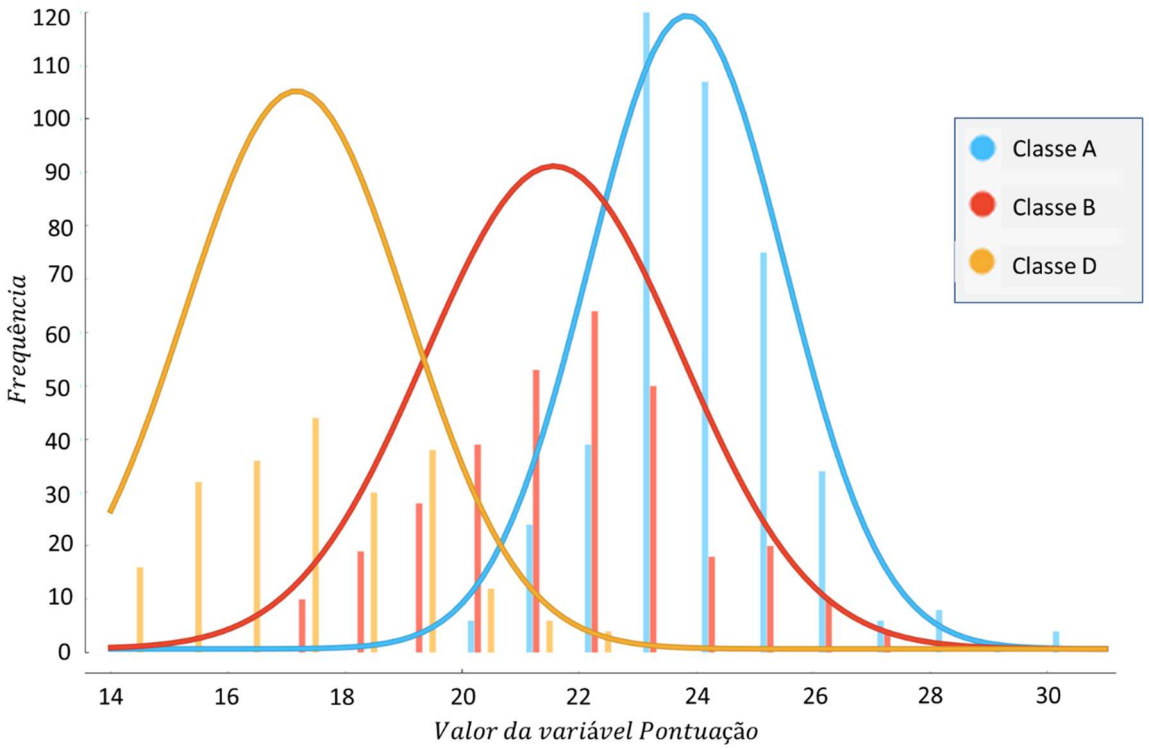


Figura 6.19 - Distribuição da variável Pontuação, em classes, para maciços secos.

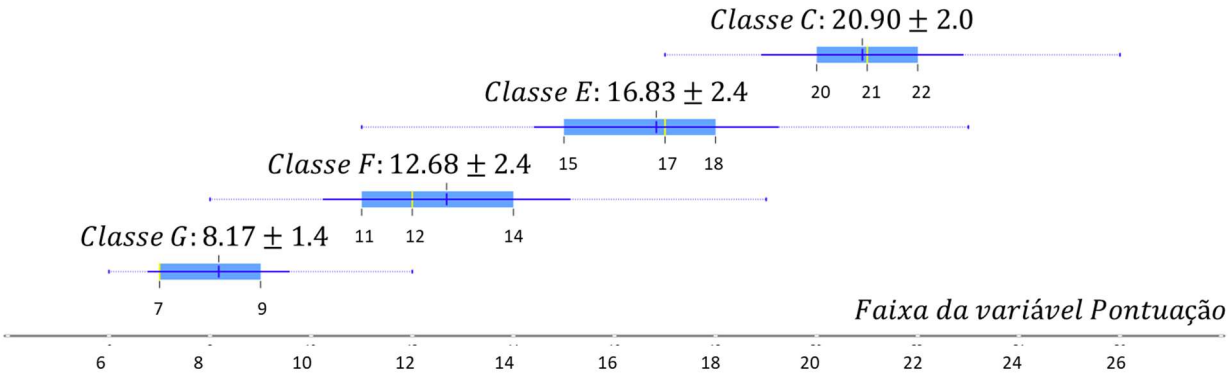


Figura 6.20 - Faixas de valores para classes considerando maciço com presença de água.

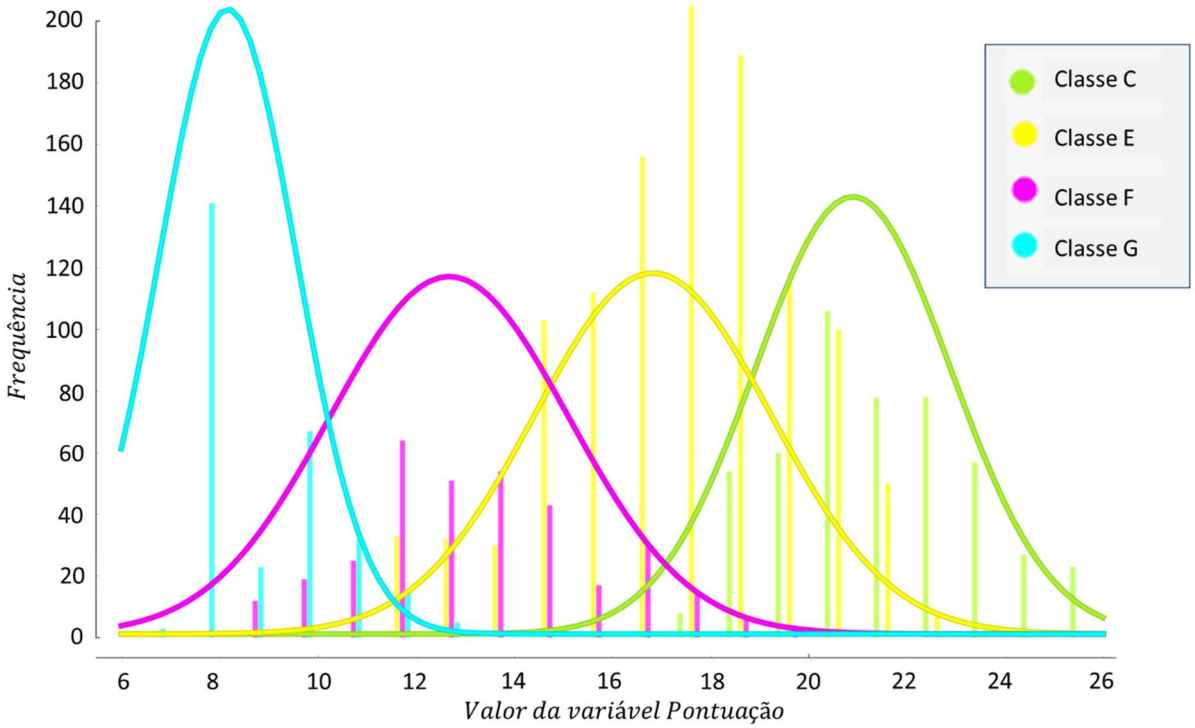


Figura 6.21 - Distribuição da variável Pontuação, em classes, para maciços com água.

Com base nas Figuras 6.18 e 6.20 a Tabela 6.13 é proposta com as faixas dos valores de pontuação para classificação dos maciços rochosos, com base nos valores dos quantis das classes. A utilização desse intervalo entre 1° e 3° quartil indica um valor de probabilidade 0,5 para o maciço pertencer àquela classe rotulada, posto isso acredita-se ser uma faixa coerente a ser adotada.

Tabela 6.13 - Faixas para os valores da variável pontuação.

Classe	1° Quartil	3° Quartil	Condição de água
Classe A	23	32 (máximo)	Maciços sem presença de água
Classe B	20	23	
Classe D	16	19	
Classe C	20	22	Maciços com presença de água
Classe E	15	19* (3°Q=18)	
Classe F	11	14	
Classe G	5 (mínimo)	10* (3°Q=9)	

6.5.6. Relação da variável pontuação com o valor do RMR

A relação entre a variável $Pontuação$ e o valor do RMR para cada amostra do banco de dados foi verificada. O coeficiente de correlação de Pearson entre as duas variáveis foi de 0,92; o que exprime forte relação linear positiva.

A Figura 6.22 apresenta o gráfico de dispersão entre as duas variáveis em estudo.

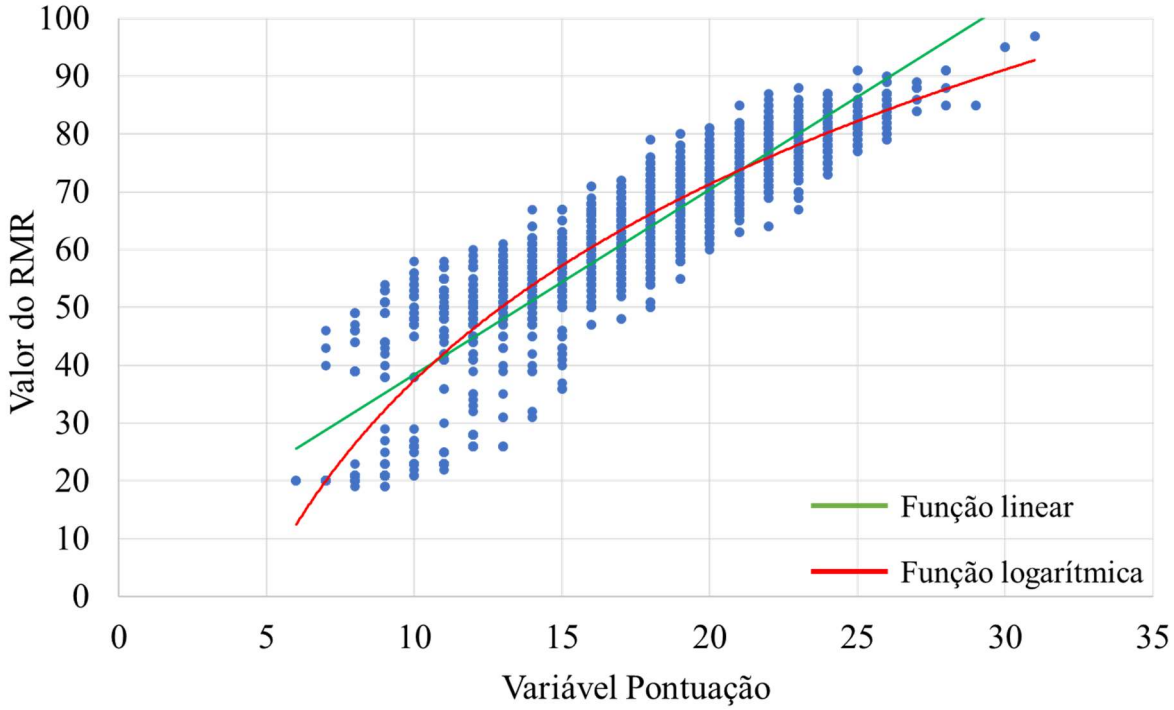


Figura 6.22 - Relação entre o valor do RMR e a variável Pontuação.

A partir da Figura 6.22 foi feito um ajuste de funções entre as duas variáveis, uma função linear e uma função logarítmica. As duas funções apresentaram ajustes interessantes com o valor do coeficiente de determinação de 0,84 para a função linear, e de 0,87 para uma função logarítmica.

A partir dos valores do coeficiente de determinação é possível afirmar que a proporção da variabilidade do valor do RMR é explicada pela variável $Pontuação$, ou seja, pode-se predizer o valor do RMR a partir da variável $Pontuação$. As Equações 6.1 e 6.2 são as funções para obter o valor do RMR a partir da variável $Pontuação$, por meio de uma função linear e logarítmica, respectivamente.

$$RMR = 3{,}20.(Pontuação) + 6{,}45 \text{ com } R^2 = 0{,}84$$

$RMR = 48{,}92.ln(Pontuação) - 75{,}23$ com $R^2 = 0{,}87$

6.5.7. Aplicação de árvores de decisão para os grupos formados

Um sistema de classificação por meio de regras de decisão, especificamente a técnica de árvores de decisão, foi aplicado ao resultado da análise de agrupamentos. Isto permitiu a visualização das decisões sobre os valores das variáveis em relação as classes rotuladas. Neste sentido, a árvore de decisão possibilita outra maneira de validação dos rótulos aplicados, além de possibilitar uma alternativa de utilização do sistema de classificação proposto por outros técnicos, diferente daquela baseada apenas na descrição do maciço rochoso.

A Figura 6.23 apresenta o resultado da árvore de decisão treinada considerando as variáveis selecionadas da análise fatorial e o rotulo obtido pelo agrupamento pela técnica PAM.

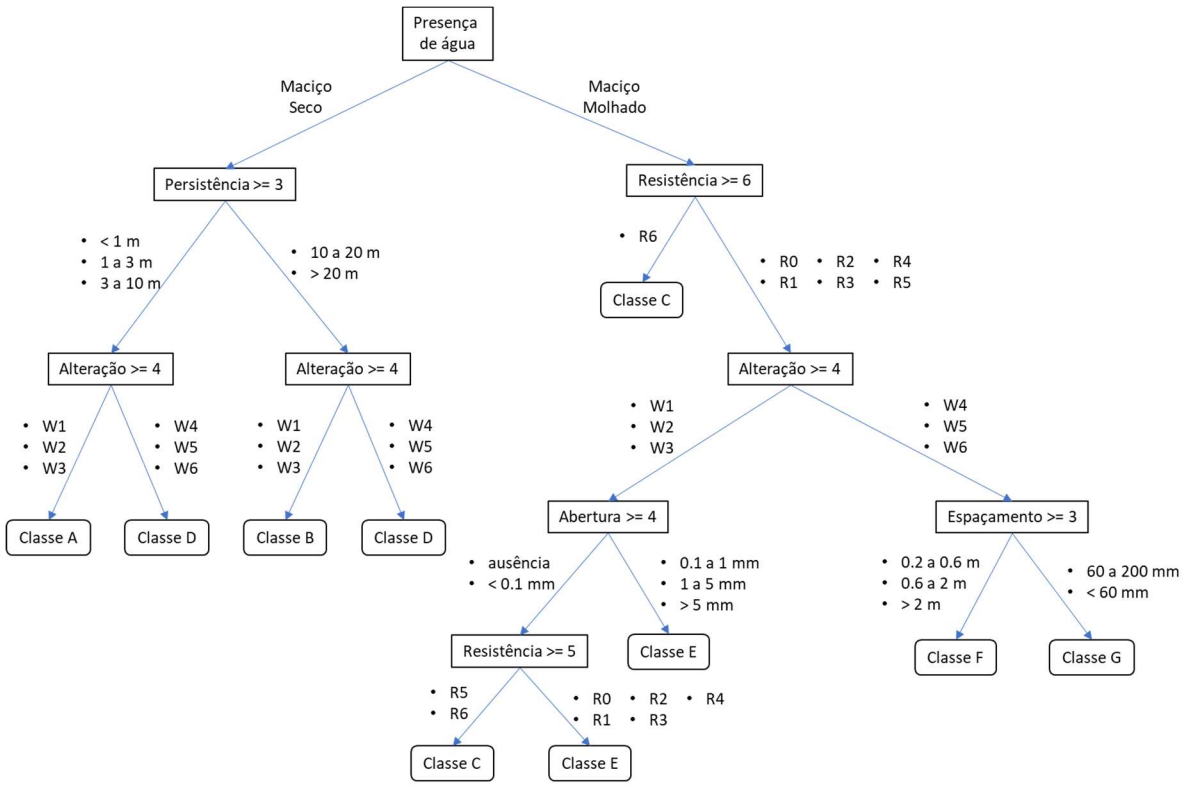


Figura 6.23 - Árvore de decisão para a classificação de acordo com os grupos formados.

A construção da arvore de decisão apresentada na Figura 6.19 foi elaborada com objetivo de extrair o máximo de informações dos grupos formados e permitir uma aplicação rápida e simples do sistema proposto, podendo ser utilizada posteriormente para se obter a classificação proposta pela presente pesquisa. Posto isso, para o treinamento e teste da árvore

não se utilizou de um sistema de partição de amostra, ou seja, todo o banco de dados foi utilizado para construção da árvore. A acurácia geral da árvore de decisão foi de 0.96.

A partir da Figura 6.19 é possível observar que o sistema foi construído discriminando os maciços a partir da presença de água. Este resultado é condizente com o resultado na análise de agrupamentos que de fato separou as classes do maciço rochoso pela variável presença de água.

Depois da presença de água, variáveis como a persistência, resistência e alteração apresentam uma importância maior para a discriminação nos grupos. Nos maciços secos observar-se a importância da persistência e alteração, enquanto nos maciços com presença de água observa-se a resistência e a alteração orientando os nós para a classificação dos maciços. Nos maciços com presença de água em níveis mais baixos da árvore variáveis como espaçamento e abertura discriminam as classes do maciço. De fato, todas as variáveis estão presentes em pelo menos um nó da árvore de decisão o que implica que todas as variáveis foram utilizadas pelo sistema de classificação.

7. Conclusões

Neste trabalho novas abordagens para classificação de maciços rochosos utilizando técnicas da estatística multivariada e aprendizado de máquina foram apresentadas. Os modelos propostos apresentaram bons índices de desempenho mostrando a adequabilidade das técnicas para a solução de problemas de classificação geomecânica. Além dos bons índices de desempenho destacam-se os resultados referentes a interpretação, os modelos conseguem mostrar as relações entre os parâmetros geomecânicos e a abordagem da classificação de maciços rochosos.

A pesquisa utilizou a identificação e seleção prévia de fatores relacionados à qualidade do maciço rochoso. A partir das variáveis selecionadas foram criados modelos de classificação, por meio de aprendizagem supervisionada e não-supervisionada. A técnica utilizada para a seleção das variáveis foi a análise fatorial e os algoritmos de aprendizado de máquina utilizados para criação dos modelos de classificação foram o *Naive Bayes*, *Random Forest*, Redes Neurais Artificiais, *Support Vector Machine* e o *Partition Around Medoids*.

O banco de dados utilizado é extenso, resultante da compilação de várias minas brasileiras, com variáveis relacionadas ao sistema de classificação RMR. A seleção de variáveis na análise fatorial permitiu minimizar a subjetividade típica dos sistemas de classificação, pois seleciona as variáveis diretamente relacionadas com a qualidade do maciço rochoso. Neste ponto, consegue-se a redução da dimensionalidade do banco de dados. Portanto, todos os modelos de classificação criados foram feitos com um número menor de variáveis, sendo diferente do sistema de classificação RMR. Outro ponto vantajoso da metodologia é a abrangência do banco de dados, que inclui rochas de diferentes classes, desde maciços com baixa qualidade até alta qualidade, o que garantiu a aplicabilidade de modelos preditivos para qualquer tipo de maciço rochoso.

O modelo fatorial se aderiu bem ao banco de dados, apresentando valores regulares para adequabilidade das amostras, comunalidades altas para as variáveis e matriz de carga fatorial com alto poder de interpretabilidade. O resultado da análise fatorial permitiu a identificação de três fatores comuns no banco de dados, Fator 1, relacionado a resistência e alteração do maciço rochoso; Fator 3, relacionado ao grau de fraturamento do maciço rochoso e o Fator 2, relacionado a condições de percolação de água no maciço rochoso.

Os modelos treinados por aprendizagem supervisionada foram validados, provando ser precisos e eficazes. Os resultados mostram que os modelos de aprendizado de máquina

forneceram bons modelos preditivos e permitiram mostrar que as variáveis selecionadas são realmente os parâmetros importantes para determinar a qualidade do maciço rochoso, visto que os modelos alcançam precisão nas validações. Os valores médios de acurácia dos modelos treinados foram de 0,81; 0,89; 0,87 e 0,89 para *Naïve Bayes*, *Random Forest*, Redes Neurais Artificiais, *Support Vector Machine*, respectivamente. Estes resultados mostraram a possibilidade de alcançar as classes do RMR com um número menor de variáveis.

O modelo treinado pela aprendizagem não-supervisionada foi construído pelo algoritmo *Partition Around Medoids*. Os estudos aplicados indicaram a formação de 7 grupos. O sistema de classificação foi construído com as variáveis obtidas da análise fatorial. O algoritmo foi capaz de separar os grupos em maciços com presença de água e maciços sem presença de água. A partir da interpretação dos valores de cada variável dentro de cada grupo formado em conjunto com o valor da variável *Pontuação* foi possível rotular e hierarquizar os grupos em classes.

A variável *Pontuação* apresentou alto valor de coeficiente de correlação de Pearson com o valor do RMR, com valor de 0,92. As funções ajustadas mostram a possibilidade de obtenção do valor do RMR a partir da variável Pontuação, com coeficiente de determinação de 0,84 para a função linear, e de 0,87 para uma função logarítmica. Logo a utilização desta variável para hierarquização foi considerada e aplicada.

Os grupos formados foram a Classe A com maciços com resistência alta, pouco alterado, pouco fraturado e seco; Classe B com maciços com resistência média, pouco alterado, com fraturamento médio e seco; Classe C com maciços com resistência alta, pouco alterado, com fraturamento médio e molhado; Classe D com maciços com resistência baixa, muito alterado, pouco fraturado e seco; Classe E com maciços com resistência média, alteração média, com fraturamento médio e molhado; Classe F com maciço com resistência baixa, alteração alta, pouco fraturado e molhado; e enfim, a Classe G com maciço com resistência baixa, alteração alta, muito fraturado e molhado.

Ainda nos resultados por aprendizagem não supervisionada foi treinada uma árvore de decisão afim de permitir utilização futura simples e rápida do sistema e facilitar a visualização da relação entre as variáveis e as classes obtidas pelo agrupamento PAM. A árvore de decisão apresentou acurácia de 0,96 o que reflete que o sistema de regras pode ser utilizado para alcançar a classificação do modelo não supervisionado.

Dentre os pontos fortes dos modelos propostos destacam-se a possibilidade de aplicação para diferentes qualidades de maciços rochosos, os modelos partem de um número menor de variáveis do RMR e mesmo assim apresentam acurácia e precisão nos resultados, portanto acredita-se que os fatores rotulados sejam coerentes. Sobre o modelo proposto pela técnica PAM, este se mostrou com alto poder de interpretação, a criação da variável pontuação permite hierarquizar as classes e se mostra com alta correlação com a variável RMR, o que pode ser interpretado como uma forma de validação do modelo. Neste contexto o trabalho apresenta novas abordagens para lidar com sistemas de classificação de maciços rochosos, diminuindo a subjetividade, aumentando a seletividade dos parâmetros, reduzindo a dimensionalidade de bancos de dados geotécnicos e otimizando a aplicação de sistemas de classificação. Assim, acredita-se que a seletividade dos parâmetros e a redução da dimensionalidade dos dados permitem a simplificação dos levantamentos geotécnicos sem influenciar na estimativa da qualidade do maciço rochoso.

As limitações dos modelos propostos é o fato dos modelos supervisionados estarem atrelados ao uso do computador, portanto podendo ser um fator limitador para uso em campo. Acredita-se que a ampliação do banco de dados pode contribuir muito com o aprendizado dos modelos e alcançar melhores ajustes.

Toda a pesquisa foi desenvolvida em um *software* livre o que permite que outros usuários apliquem a metodologia proposta. Além disso, os usuários podem ampliar o banco de dados potencializando o poder de aprendizagem dos algoritmos.

Embora a matemática das técnicas aplicadas seja complexa, os resultados são fáceis de interpretar e aplicar. Assim, acredita-se na confiabilidade do modelo preditivo proposto, além da possibilidade de otimização por meio da utilização de bases de dados mais amplas.

A presente pesquisa estabelece um ponto de partida para discussão no tema de classificação de maciços rochosos por meio de técnicas quantitativas. Portanto como sugestões para trabalhos futuros, pontuam-se os seguintes temas:

- Ampliação da base de dados e inclusão nos processos de treinamento dos algoritmos, com objetivo de aperfeiçoamento dos modelos;
- Desenvolvimento da metodologia proposta partindo de outros sistemas de classificação, que sejam diferentes do RMR;
- Estudo e aplicação de outras técnicas de *feature selection*, que sejam diferentes da análise fatorial com objetivo de verificar os fatores formados;

- Aplicação da metodologia proposta para banco de dados de minas subterrâneas brasileiras;
- Desenvolvimento de um software, de interface amigável, com a metodologia proposta, principalmente para os métodos supervisionados, para classificação de maciços;
- Aplicação de outras técnicas de aprendizado e comparação dos resultados;
- Desenvolvimento de um modelo para determinação de incertezas nas classes propostas pelo método não-supervisionado, PAM, por meio de ajuste de algoritmos supervisionados.

Referências bibliográficas

ABAD, J. CELADA, B. CHACON, E. GUTIERREZ V. and HIDALGO, E. Application of Geomechanical Classification to Predict the Convergence of Coal Mine Galleries and to Design Their Supports. Proc. 5th Int. Congr. Rock Mech., ISRM, Melbourne, vol. 2, 1983, pp. E15-E19.

AHOUR, M. HATAF, N. AZAR, E. A Mathematical Model Based on Artificial Neural Networks to Predict the Stability of Rock Slopes Using the Generalized Hoek–Brown Failure Criterion. Geotech Geol Eng 38, 2020, p. 587–604.

ÁVILA, C. R. Determinação das propriedades mecânicas de maciços rochosos e/ou descontinuidades utilizando classificações geomecânicas – uma comparação entre os diversos métodos de classificação. Dissertação de Mestrado. NUGEO, Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto, 232 p. 2012.

BARHAM, W. S. RABAB'AH, S. R. ALDEEKY, H. H. et al. Mechanical and Physical Based Artificial Neural Network Models for the Prediction of the Unconfined Compressive Strength of Rock. Geotech Geol Eng 38, 2020, p. 4779–4792.

BARTLETT, M. S. A note on multiplying factors for various Chi-Square approximations. Journal of the royal Statistical Society –Series B. v.16, 1954, p.296-298.

BARTON, N. R. & CHOUBEY, V. The shear strength of rock joints in theory and practice. Rock Mechanics, vol 10, n. 1-2, 1977, pp 1-54.

BARTON, N. Some new Q value correlations to assist in site characterization and tunnel design. Int. J. Rock Mech. Min. Sci, vol. 39, 2002, pp.184-216.

BARTON, N., LIEN, R. AND LUNDE, J. Engineering classification of rock masses for the design of rock support. Rock Mechanics 6, 1974, pp. 189-236.

BASGALUPP, M. P. Legal-Tree: Um algoritmo genético multi-objetivo lexicográfico para indução de árvores de decisão. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo, 2010, 94p.

BIENIAWSKI Z. T. Engineering rock mass classifications: a complete manual for engineers and geologists in mining, civil, and petroleum engineering". John Wiley & Sons, New York, 251. pp, 1989.

BIENIAWSKI, Z. T. Engineering classification of jointed rock masses. Trans. S. African Instn. *Civ. Engrs*., Vol. 15, No 12, Dec. 1973, pp 335 - 344.

BRAGA, A. P., CARVALHO, A. C. P. L. F., LUDENIR, T. B. Redes neurais Artificiais - teoria e aplicação. 1ª Ed. Rio de janeiro – RJ: Editora LTC, 2000.

BREIMAN, L. Random forests. Machine Learning, vol 45(1), 2001, p. 5–32.

BURGES, C. J. C. A tutorial on support vector machines for pattern recognition. Knowledge Discovery and Data Mining, vol.2(2), 1998, p.1–43.

CASSIANO, K. M. Análise de séries temporais usando análise espectral singular (SSA) e clusterização de suas componentes baseada em densidade. Tese de doutorado. Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2014, 172 p.

CHAWLA, N.V. BOWYER, K.W. HALL, L.O. KEGELMEYER, W.P. Smote: Synthetic minority over-sampling technique. Journal of Artificial Intelligence Research, vol. 16, 2002, p.321-357.

CONGALTON, R. G. A review of assessing the accuracy of classifications of remotely sensed data. In. Remote Sensing of Environment, volume 49, 1991, p. 1671-1678.

CYBENKO G. Approximation by superpositions of a sigmoid function. Mathematics of Control, Signals and Systems, vol.2, 1989, p.303-314.

DEERE D. U., PECK R., MONSEES J. E. and SCHMIDT B. Design of tunnel liners and support system. Office of high speed ground transportation, U.S. Department of transportation, 1969.

DEERE, D. U. AND MILLER, R. P. Engineering classification and index properties for intact rocks". Tech. Rep. Nº AFWL-TR-65-116, Uni. of Illinois, Urbana, 1966, 299p.

DEERE, D. U. DEERE, D. W. The rock quality designation (RQD) index in practice. Rock classification systems for engineering purposes, Ed. L. Kirkaldie, ASTM Special. 1988.

DEERE, D. U., HENDRON, A. J., PATTON, F. D. AND CORDING, E. J. Design of surface and near surface construction in rock. In Failure and breakage of rock, proc. 8th U.S. symp. Rock mech., 237-302. New York: Soc. Min. Engrs, Am. Inst. Min. Metall. Petrolm Engrs. 1967, pp.237-302.

DUNN, J. C. A Fuzzy Relative of the ISODATA Process and Its Use in Detecting Compact Well-Separated Clusters. Journal of Cybernetics 3. 1973, p. 32-57.

ESTER, M., KRIEGEL, H. P., SANDER, J. & XU, X. Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise. KDD96 Proceedings. 1996, p. 226-231.

FISHER, R. A. The use of multiple measurements in taxonomic problems. Annals of Eugenics, 7, 1936, 179–188.

FLEISS, J.L. Statistical methods for rates and proportions. New York: John Wiley; 1981. p. 212-36.

FONSECA, J. Indução de árvores de decisão. Dissertação de Mestrado, Universidade Nova de Lisboa, 1994.

FRANKLIN, J. A. An Observational Approach to the Selection and Control of Rock Tunnel Linings. Proc. Conf. Shotcrete Ground Control, ASCE, Easton, MA, 1976, pp. 556-596.

FUNUHASHI K. I. On the approximate realization of continuous mappings by neural networks. Neural Networks, vol2, 1989, pp.183-192.

GARAVAGLIA, S. SHARMA, A. A smart guide to dummy variables: Four applications and a macro. Proceedings of the Northeast SAS Users Group Conference. 43, 1998.

GARCÍA-GONZALO E., FERNÁNDEZ-MUÑIZ Z., GARCÍA NIETO P. J., BERNARDO SÁNCHEZ A., MENÉNDEZ FERNÁNDEZ M. Hard-Rock Stability Analysis for Span Design in Entry-Type Excavations with Learning Classifiers. Materials (Basel). Jun 29;9(7) 2016, p. 531.

GOKCEOGLU, C. YESILNACAR, E. SONMEZ, H. KAYABASI, A. A neurofuzzy model for modulus of deformation of jointed rock masses. Comput Geotech 31, 2004, p. 375–383.

GOODFELLOW, I. BENGIO, Y. COURVILLE, A. Deep Learning. The MIT Press, Cambridge, MA, USA. 2016, p. 800.

GRIMSTAD, E. BARTON, N. Updating the Q-system for NMT. Proc. Int. Symp. on Sprayed Concrete, Fagernes, Norway 1993. Norwegian Concrete Association, Oslo, 1993, 22p.

GÜNTHER F., FRITSCH S. neuralnet: Training of neural networks. The R Journal. 2(1). 2010, p.30-38.

HAIR, J. F. ANDERSON, R. E. TATHAM, R. L. BLACK, W. C. Análise Multivariada de Dados. Tradução de A. S. Sant'anna e A. Cloves Neto, 6.ed. Porto Alegre: Bookman, 2009, 593 p.

HAYKIN, S. Redes Neurais - Princípios e Prática, 2ª edição. Editora Bookman, Porto Alegre, RS. 2001.

HEARST, M. A. SCHÖLKOPF, B. DUMAIS, S. OSUNA, E. PLATT, J. Trends and controversies - support vector machines. IEEE Intelligent Systems, vol. 13(4), 1998, p. 18–28.

HERBRICH, R. Learning Kernel Classifiers: Theory and Algorithms. MIT Press, 2001.

HERTZ, A. KROGH, AND R. G. PALMER. Introduction to the Theory of Neural Computation. Vol. I of Santa Fe Institute Studies in The Science of Complexity. Addison Wesley, 1991.

HOEK, E. AND BROWN, E. T. Underground excavations in rock. Institution of Mining and Metallurgy, London 1980, 527 pp.

HOEK, E. Strength of rock and rock masses. ISRM New Journal 2(2), 416, 1994.

HOEK, E., KAISER, P. K., BAWDEN. W. F. Support of underground excavations in hard rock. Rotterdam: Balkema. p. 215. 1995.

HOEK, E.; BROWN, E. T. Practical estimates of rock mass strength. International Journal Of Rock Mechanics And Mining Sciences, [s.l.], v. 34, n. 8, p.1165-1186, dez. 1997.

HUDSON, J. A., HARRISON J. P. Engineering rock mechanics: an introduction to the principles. Elsevier Science Ltd Oxford, UK, 1997.

IGEL C., HÜSKEN M. Improving the Rprop learning algorithm. In: H. Bothe, R. Rojas (Eds.), Proceedings of the Second International Symposium on Neural Computation, NC 2000, ICSC Academic Press, Canada/Switzerland. 2000.

ISRM - International Society for Rock Mechanics. Rock Characterization, Testing and Monitoring – ISRM Suggested methods, Pergamon Press, Oxford, E.T. Brown (ed), 1981, p. 211.

JOHNSON, R. A.; WICHERN, D. W. Applied Multivariate Statistical Analysis. 6ª ed. Pearson, 2018. 808 p.

KAISER, H. A second generation Little Jiffy. Psychometrika, vol. 35, 1970, p. 401-15.

KAISER, H.F. The varimax criterion for analytic rotation in factor analysis. Psychometrika. v.23, 1958, pp.187-200.

KAUFMAN L., ROUSSEEUW P. J. Finding Groups in Data – An Introduction to Cluster Analysis. Wiley-Interscience Publication. 1989.

KENDORSKI, F. CUMMINGS R. BIENIAWSKI Z. T. AND SKINNER E. Rock Mass Classification for Block Caving Mine Drift Support. Proc. 5th Int. Congr. Rock Mech., ISRM, Melbourne, 1993, pp. B51-B63.

KLEN, A. M. LANA, M. S. Fuzzy Algorithm of discontinuity sets. Rem: Rev. Esc. Minas. vol.67, n.4, 2014, p.439-445.

KOHONEN, T. Self-organization and associative memory. 3rd edition. Springer-Verlag. 1989.

KUHN, M. JOHNSON, K. Applied Predictive Modeling. Springer, New York, 2013. 613p.

LANDIS, J. R. KOCH, G. G. The measurement of observer agreement for categorical data. Biometrics. 1977, 33(1):159-74

LANTZ B. Machine learning with R. Birmingham: Packt Publishing Ltd. 2013. p. 375.

BREIMAN, L.; FRIEDMAN, J. H.; OLSHEN, R. A.; STONE, C. J. Classification and regression trees. Wadsworth International: California, USA, 1984.

LAUBSCHER, D. H. AND TAYLOR, H. W. The importance of geomechanics classification of jointed rock masses in mining operations. In Exploration for rock engineering, (ed. Z.T. Bieniawski) 1, 119-128. Cape Town: Balkema, 1976.

LAUBSCHER, D. H. Geomechanics classification of jointed rock masses – mining applications. Trans. Instn. Min. Metall. 86, A1-8, 1977.

LAUBSCHER, D. M. AND PAGE, C. H. The design of rock support in high stress or weak rock environments. Proc. 92nd Can. Inst. Min. Metall. AGM, Ottawa, 1990.

LAUFFER, H. Gebirgsklassifizierung für den Stollenbau. Geol. Bauwesen 24(1), 1958, pp. 46-51.

LI, W. X. QI, D. L. ZHENG, S. F. REN, J. C. LI, J. F. LIN, X. Fuzzy mathematics model and its numerical method of stability analysis on rock slope of opencast metal mine. Applied Mathematical Modelling. 39(7), 2015, p. 1784-1793.

LIAW, A. WIENER, M. Classification and regression by randomForest. R News, 2(3), 2002, pp.18-22.

LIU, Y. C. CHEN, C. S. A new approch for application of rock mass classification on rock slope stability assessment. Engineering Geology, Vol. 89, 2006, p. 129-143.

LORENA, A. C. CARVALHO, A. C. P. L. F. Uma Introdução às Support Vector Machines. Revista de Informática Teórica e Aplicada, Porto Alegre, RS, v. 14, n. 2, 2007, p. 43-67.

MELCHIORRE, C. CASTELLANOS ABELLA, E. A. VAN WESTEN, C. J. MATTEUCCI, M. Evaluation of prediction capability, robustness, and sensitivity in non-linear landslide susceptibility models, Guantánamo, Cuba. Comput Geosci. 37, 2011, p.410-425.

MEULENKAMP, F., ALVAREZ GRIMA, M. Application of neural networks for the prediction of the unconfined compressive strength (UCS) from Equotip hardness. Int J Rock Mech Min Sci 36, 1999, p. 29–39.

MEYER, D., DIMITRIADOU, E., HORNIK, K., WEINGESSEL, A., LEISCH, F. Package ‘e1071’. 2012.

MINGOTI, S. A. Análise de dados através de métodos de estatística multivariada: uma abordagem aplicada. 1. ed. Belo Horizonte: Editora UFMG. 2005.

MONJEZI, M. AMIRI, H. FARROKHI, A. GOSHTASBI, K. Prediction of rock fragmentation due to blasting in Sarcheshmeh copper mine using artificial neural networks. Geotech Geol Eng 28, 2010, p.423–430.

MÜLLER, K. R. MIKA, S. RÄTSCH, G. TSUDA, K. SCHÖLKOPF, B. An introduction to kernel-based learning algorithms. IEEE Transactions on Neural Networks, 12(2), 2001, p.181–201.

NAMIN, A. H. LEBOEUF, K. WU, H. AHMADI, M. Artificial neural networks activation function HDL coder. In: 2009 IEEE Int. Conf. Electro/Information Technol., pp. 389–392.

NAZARETH, A. F. D. V. Análise de agrupamentos aplicada à setorização geotécnica de minas a céu aberto. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mineral) - Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, 2020, p. 170.

NEJATI, H.R. GHAZVINIAN, A. MOOSAVI, S. A. SARFARAZI, V. On the use of the RMR system for estimation of rock mass deformation modulus. Bull Eng Geol Environ. 73, 2014, p. 531–540.

OHADI, B., SUN, X., ESMAIELI, K. et al. Predicting blast-induced outcomes using random forest models of multi-year blasting data from an open pit mine. Bull Eng Geol Environ 79, 2020, p. 329–343.

OSHIRO, T. M. Uma abordagem para a construção de uma única árvore a partir de uma Random Forest para classificação de bases de expressão gênica. Dissertação (Mestrado em Bioinformática) - Bioinformática, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

PACHER, F. RABCEWICZ L. AND GOLSER, J. Zum der seitigen Stand der Gebirgsklassifizierung in Stollen-und Tunnelbau." Proc. XXII Geomech. Colloq., Salzburg, 1974, pp. 51-58.

PALMSTRÖM A. SINGH R. The deformation modulus of rock masses - comparisons between in situ tests and indirect estimates. Tunneling Underground Space Technol 2001; vol.16, 2001, pp.115-131.

PALMSTROM, A. Combining the RMR, Q, and RMi classification systems. www.rockmass.net, 2009, 25p.

PALMSTRÖM, A. RMi - a new practical characterization system for use in rock engineering." Conference Svenska Bergmekanikdagen, Stockholm, 1996, pp. 39-63.

PALMSTRÖM, A. RMi –a rock mass characterization system for rock engineering purposes. Ph.D. thesis, Oslo University, Norway, 1995, 400 p.

PALMSTRÖM, A. The volumetric joint count - a useful and simple measure of the degree of jointing." Proc. IV Int. Congr. IAEG, New Delhi, 1982, pp.221-228.

PANTELIDIS, L. Rock slope stability assessment through rock mass classification systems. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, Vol. 46, 2009, p. 315-325.

PELLS, P. J. N., BERTUZZI, R. Limitations of rock mass classification systems for tunnel support designs. Tunnels Tunn Int, 2007, 1-11.

PEREIRA, T. M. Estatística Multivariada I – Uma Abordagem aplicada utilizando o software R. Departamento de Estatística – Universidade Federal de Ouro Preto. 256 p. 2015.

PINHEIRO, M. SANCHES, S. MIRANDA, T. NEVES, A. TINOCO, J. FERREIRA, A. CORREIA, A. G. A new empirical system for rock slope stability analysis in exploitation stage. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, Vol. 76, 2015, p. 182-191.

PONTIL, M. VERRI, A. Support vector machines for 3-D object recognition. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 20(6). 1998, p.637–646.

POTVIN, Y., DIGHT, P. M., J. WESSELOO. Some pitfalls and misuses of rock mass classification systems for mine design. Journal- South African Institute of Mining and Metallurgy 112, 2012, 697-702.

PRIEST S. D. AND HUDSON J. A. Discontinuity spacings in rock. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr, vol.13, 1976, pp. 135-48.

QUINLAN, J. R. c4.5: programs for machine learning. Morgan Kaufmann Publishers: San Mateo, USA, 1993.

QUINLAN, J. R. Introduction of decision trees: Machine Learning vol. 1. 1986, pp. 81- 106.

R CORE TEAM (2018). R: A Language and Environment for Statistical Computing. R Foundation for Statistical Computing. Vienna, Austria. URL: https://www.R-project.org/.

REVELLE, W. Package 'psych'. 2020 <https://cran.r-project.org/web/packages/psych/psych.pdf >

RIEDMILLER M. Advanced supervised learning in multi-layer perceptrons – from backpropagation to adaptive learning algorithms. Computer Standards and Interfaces. Vol.16, 1994, p. 265-278.

RIEDMILLER M., BRAUN H. A direct adaptive method for faster backpropagation learning: The RPROP algorithm. Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks, IEEE Press. 1993.

ROMANA M. A geomechanics classification for slopes: Slope Mass Rating. In "Comprehensive Rock Engineering". Ed. J. Hudson. Pergamon. Vol 3, 1993, p. 575-600.

ROUSSEEUW, P. J. Silhouettes: A graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. J. Comput. Appl. Math., 20, 1987, pp. 53-65.

SAKELLARIOU, M. G., FERENTINOU, M. D. A study of slope stability prediction using neural networks. Geotech Geol Eng 23, 2005, p. 419.

SAMUI, P. KOTHARI, D. P. Utilization of a least square support vector machine (LSSVM) for slope stability analysis. Sci Iran. 18, 2011, p. 53-58.

SANTOS, A. E. M. AMARAL, T. K. M. MENDONCA, G. A. SILVA, D. F. S. Open stope stability assessment through artificial intelligence. REM, Int. Eng. J. vol.73, n.3, 2020, pp.395-401.

SANTOS, A. E. M. LANA, M. S. CABRAL, I. E. PEREIRA, T. M. ZARE NAGHADEHI, M. SILVA, D. F. S. SANTOS, T. B. Evaluation of Rock Slope Stability Conditions Through Discriminant Analysis. Geotechnical and Geological Engineering, 2018, pp. 1 – 28. [1]

SANTOS, T. B. Análise de risco geotécnico em taludes rochosos de mina com uso de técnicas estatísticas multivariadas e de aprendizado de máquina. Tese de Doutorado. Programa de Pós Graduação em Engenharia Mineral - Universidade Federal de Ouro Preto, 2019. 106 p.

SANTOS, TATIANA BARRETO DOS; LANA, MILENE SABINO ; PEREIRA, TIAGO MARTINS ; CANBULAT, ISMET . Quantitative hazard assessment system (Has-Q) for open pit mine slopes. INTERNATIONAL JOURNAL OF MINING SCIENCE AND TECHNOLOGY, v. 29, p. 419-427, 2018. [2]

SANTOS, Y. L., CHAVES, S., PAREDES, J., ZENÓBIO, Â. Proposta de índice de ajuste (Aw) utilizando o grau de intemperismo no sistema RMR (Rock Mass Rating) de classificação do maciço rochosos. CBMINA 12. 2012.

SERAFIM, J. L. E PEREIRA J. P. Consideration of the geomechanics classification of Bieniawski. Proc. Int. Symp. on Engineering Geology and Underground construtions, 1983, pp. 1133-1144.

SHANMUGANATHAN S., SAMARASINGHE S. Artifical Neural Network Modeling. Springer International Publishing, Switzerland. 2016.

SILVA, L. M. O. Uma aplicação de árvores de decisão, redes neurais e KNN para a identificação de modelos ARMA não sazonais e sazonais. Tese de doutorado. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Elétrica. Rio de Janeiro, 2005. 145 p.

SINGH, T. N. Application of equivalent material models in mines and tunnels. In: Proc. Workshop on Rock Mech. Problems of Tunnels and Mine Roadways Srinagar Sec. 4.2, 1986, 1–11.

SINGH, V. K. SINGH, D. SINGH, T. N. Prediction of strength properties of some schistose rocks from petrographic properties using artificial neural networks. Int J Rock Mech Min Sci 38, 2001, p.269–284.

SMOLA, A. J. SCHÖLKOPF, B. A tutorial on support vector regression. Technical Report NC2-TR-1998-030, NeuroCOLT2, 1998.

SMOLA, A. J. SCHÖLKOPF, B. Learning with Kernels. The MIT Press, Cambridge, MA, 2002.

SNEATH, P. H. A. The application of computers to taxonomy. Journal of General Microbiology 17 (1), 1957, p. 201–226.

SÖRENSEN T. (1948) A method of establishing groups of equal amplitude in plant sociology based on similarity of species content / Kongelige Danske Videnskabernes Selskab. Biol. krifter. Bd V. n 4. 1948, p. 1-34.

STEINHAUS, H. Sur la division des corp materiels en parties. Bulletin of Acad. Polon. Sci., IV(C1. III), 1956, 801–804.

STILLE, H. GROTH, T. and FREDRIKSSON, A. FEM-Analysis of rock mechanical problems with JOBFEM, Stiftelsen Bergteknisk Forskning – BeFo, Stockholm, 1982, 307: 1-82.

TAKAHASHI, A. Máquina de vetores-suporte intervalar. Tese (Doutorado em Automação e Sistemas; Engenharia de Computação; Telecomunicações) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2012.

TERZAGHI, K. Introduction to tunnel geology. In Rock tunnelling with steel supports, by Proctor and White, 1946, pp 5-153.

THORNDIKE, R. L. Who belongs in the family? Psychometrika, 18(4), 1953, 267–276, 12.

ULUSAY, R., OZKAN, I., UNAL, R. Characterization of weak, stratified and clay bearing rock masses for engineering applications. Proc Conference on Fractured and Jointed Rock Masses, Lake Tahoe, 1992, pp 233–240.

ÜNAL, E. AND ÖZKAN, Determination of Classification Parameters for Clay-bearing and Stratified Rock Mass, 9th Conference on Ground Control in Mining, Morgantown, USA, 1990, p. 250-259.

ÜNAL, E. Modified Rock Mass Classification: M-RMR System – Milestones in Rock Engineering: A Jubilee Collection; Z.T. Bieniawski, Balkema, 1996, pp.203-223.

VALE, M. N. Agrupamentos de Dados: Avaliação de Métodos e Desenvolvimento de Aplicativo para Análise de Grupos. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2005. 120p.

VAPNIK, V. N. CHERVONENKIS, A. Y. On the uniform convergence of relative frequencies of events to their probabilities. Theory of Probability and its Applications, vol 16(2), 1971, p. 283–305.

VAPNIK, V. N. The nature of Statistical learning theory. Springer-Verlag, New York, 1995.

VON ZUBEN, F. J.. ATTUX, R. R. F. Árvores de Decisão, Tópico 7 das Notas de Aula do Curso de Pós-Graduação IA004 - Redes Neurais II, FEEC/Unicamp, 2010.

WARD, J. H., JR. Hierarchical Grouping to Optimize an Objective Function, Journal of the American Statistical Association, 58, 1963, p. 236–244.

WICKHAM, G. E. TIEDEMANN, H. R. AND SKINNER, E. H. Support determination based on geologic predictions. In Proc. North American rapid excav. tunneling conf., Chicago, New York, 1972, pp. 43-64.

WILLIAMSON, D. A. Unified Rock Classification System: Bulletin, Association of Engineering Geologists, Vol. 21, No. 3, 1984, pp 345-354.

YUAN, C. YANG, H. Research on K-Value Selection Method of K-Means Clustering Algorithm. J 2019, 2, 226-235.

ZARE NAGHADEHI, M. JIMENEZ, R. KHALOKAKAIE, R. JALALI, S. M. E. A new open-pit mine slope instability index defined using the improved rock engineering systems approach. International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, vol. 61, 2013, p. 1-14.

ZARE NAGHADEHI, M. JIMENEZ, R. KHALOKAKAIE, R. JALALI, S. M. E. A probabilistic systems methodology to analyze the importance of factors affecting the stability of rock slopes. Engineering Geology, Vol. 118, 2011, p. 82-92.

Apêndice A – Estatística básica do banco de dados

Na Tabela A1, tem se V1 como número de dados, V2 como dados faltantes, V3 como média, V4 como desvio padrão, V5 como variância, V6 como valor mínimo, V7 como o 1° Quartil, V8 como mediana, V9 como 3° Quartil, V10 como Valor Máximo, V11 como moda, e V12 como número de dados que compõe a moda.

Tabela A1 - Estatística básica do banco de dados final.

Variável	V1	V2	V3	V4	V5	V6	V7	V8	V9	V10	V11	V12
Resistencia	3210	0	3.9034	1.7257	2.9779	0	3	4	5	6	5	900
Alteração	3210	0	4.2436	1.4388	2.0703	1	3	5	5	6	5	1422
Espaçamento	3210	0	3.1249	1.0264	1.0536	1	3	3	4	5	3	1318
Persistência	3210	0	2.0738	1.2086	1.4607	1	1	1	3	5	1	1627
Abertura	3210	0	2.1196	1.2425	1.5438	1	1	2	3	5	1	1229
Rugosidade	3210	0	3.2209	0.6019	0.3622	2	3	3	4	5	3	1999
Preenchimento	3210	0	3.8414	1.5976	2.5523	1	2	5	5	5	5	1936
Água	3210	0	2.1938	1.8306	3.351	1	1	1	5	5	1	2252

Nas Figuras A1 a A8 estão apresentados os gráficos de barras para as variáveis resistência, alteração, espaçamento, persistência, abertura, rugosidade, preenchimento e água, respectivamente. Na Figura A9 está apresentando o Boxplot para as variáveis.

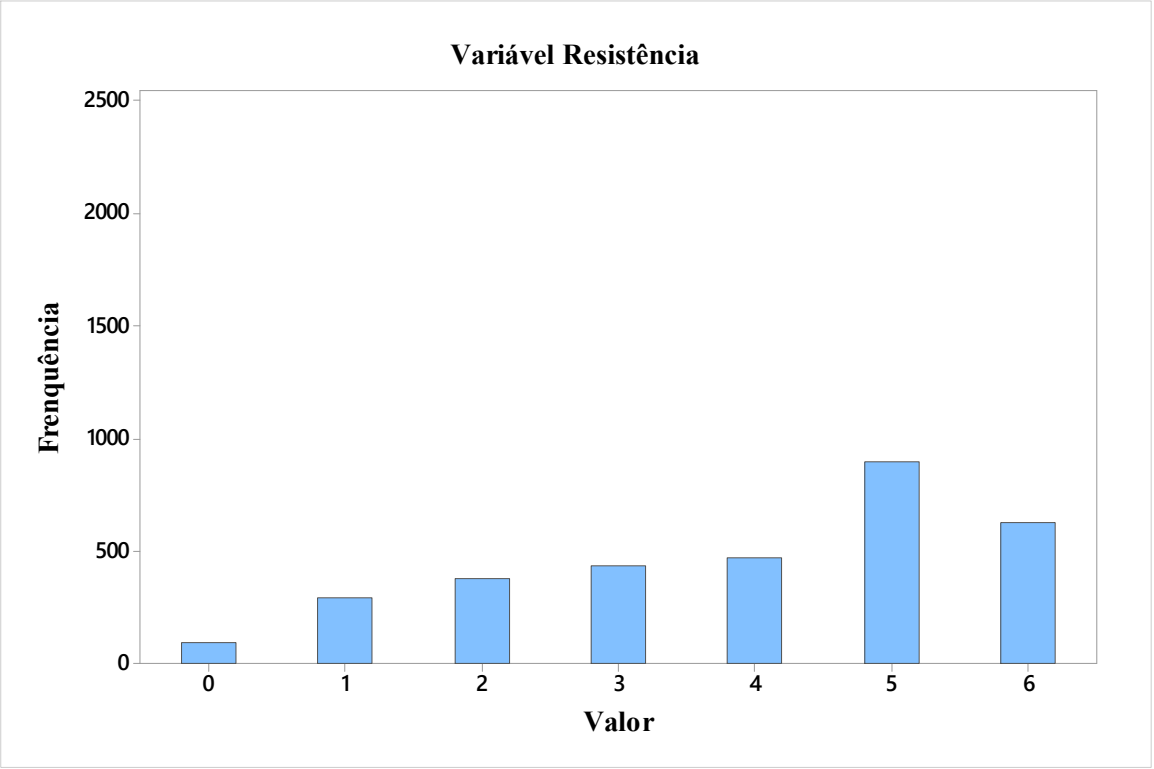


Figura A1 – Gráfico de barras para variável resistência.

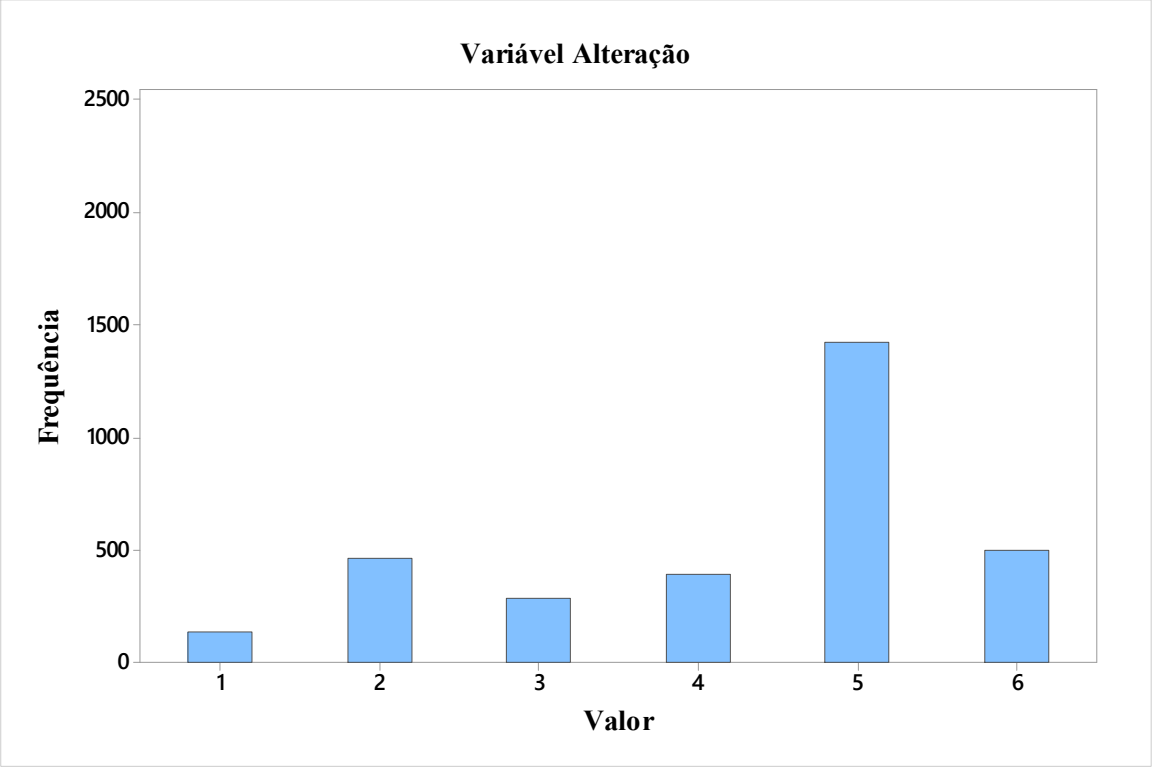


Figura A2 – Gráfico de barras para variável alteração.

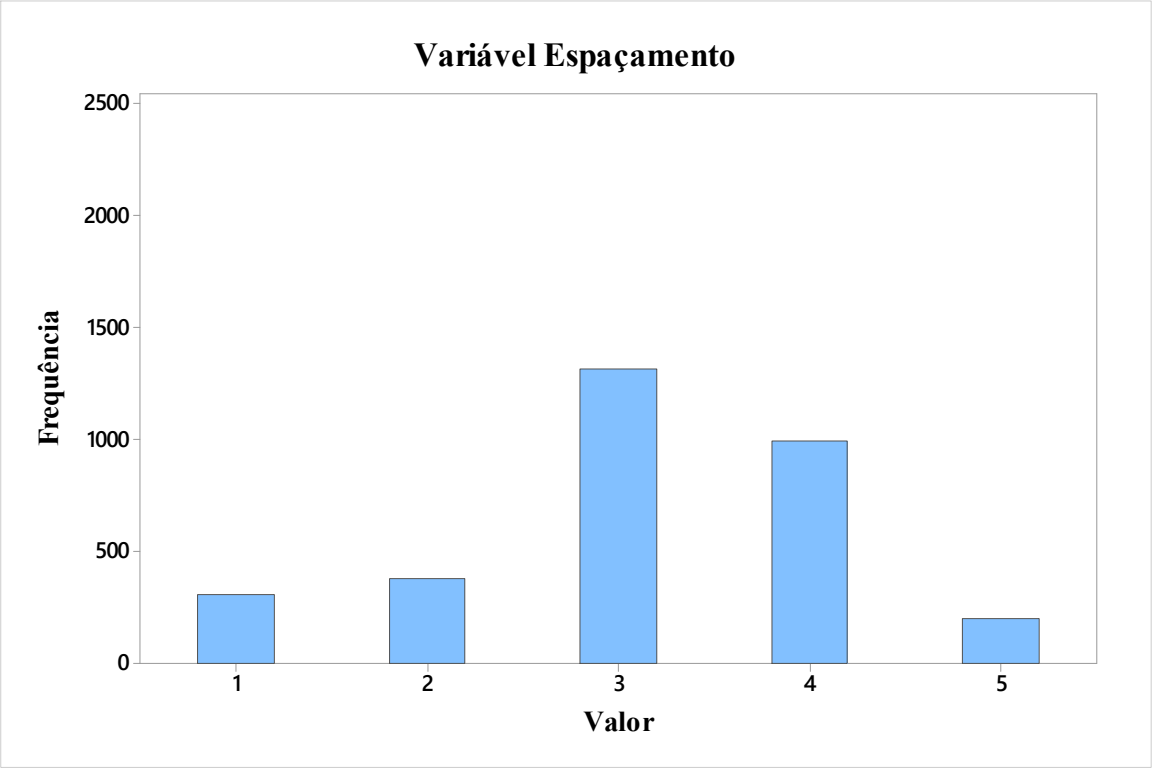


Figura A3 – Gráfico de barras para variável espaçamento.

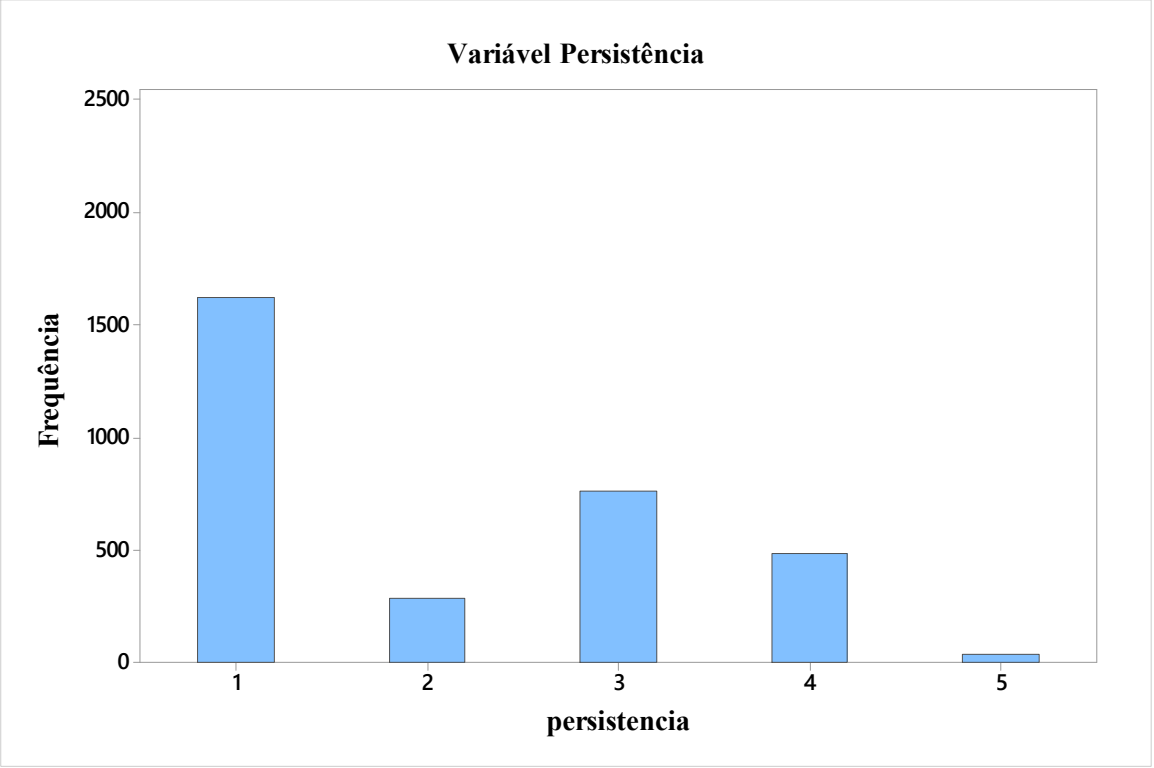


Figura A4 – Gráfico de barras para variável persistência.

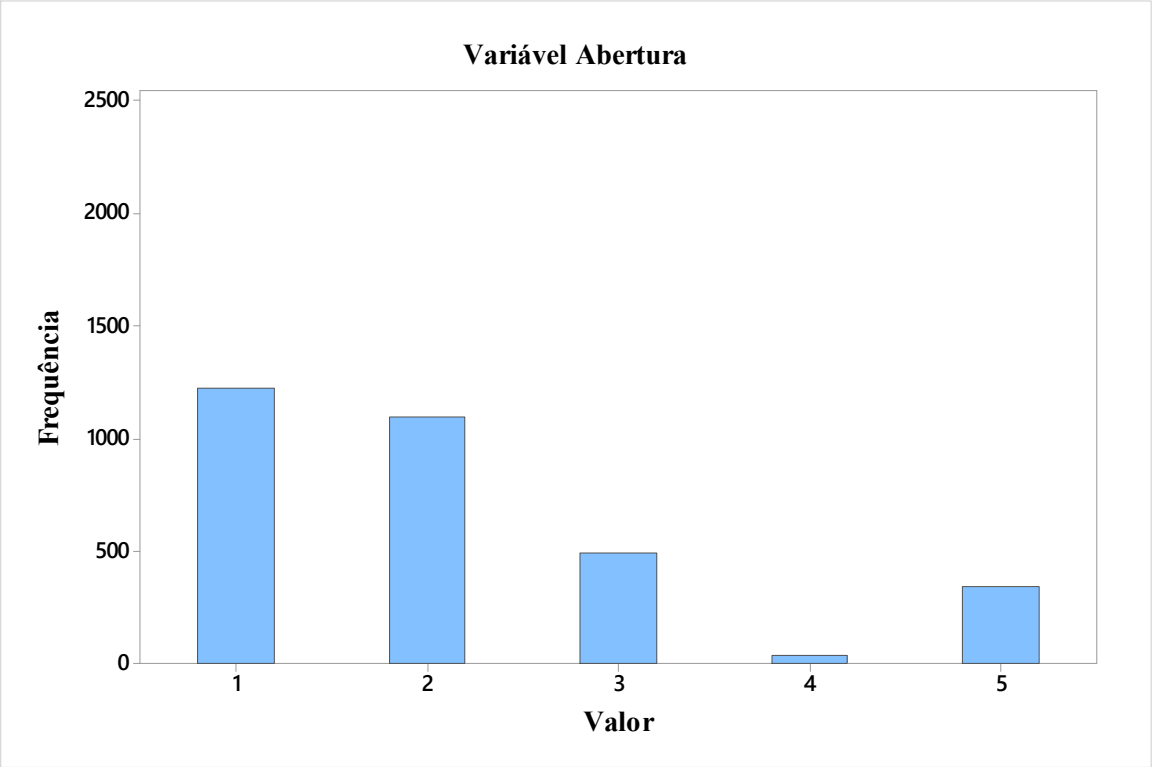


Figura A5 – Gráfico de barras para variável abertura.

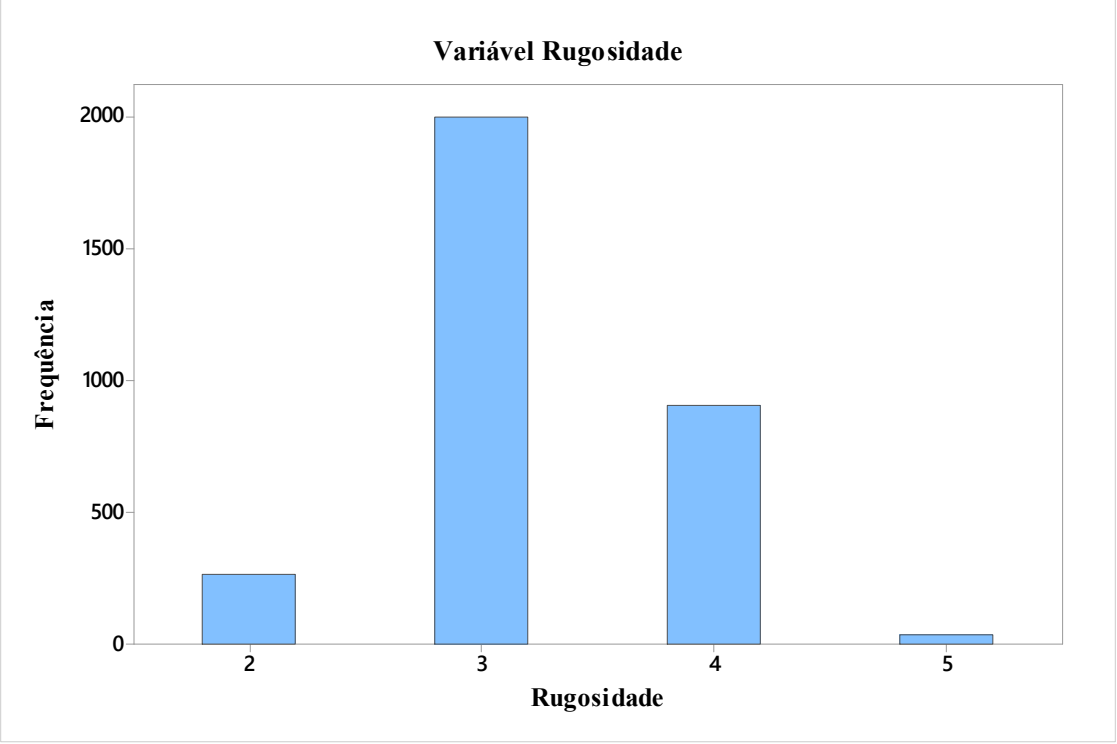


Figura A6 – Gráfico de barras para variável rugosidade.

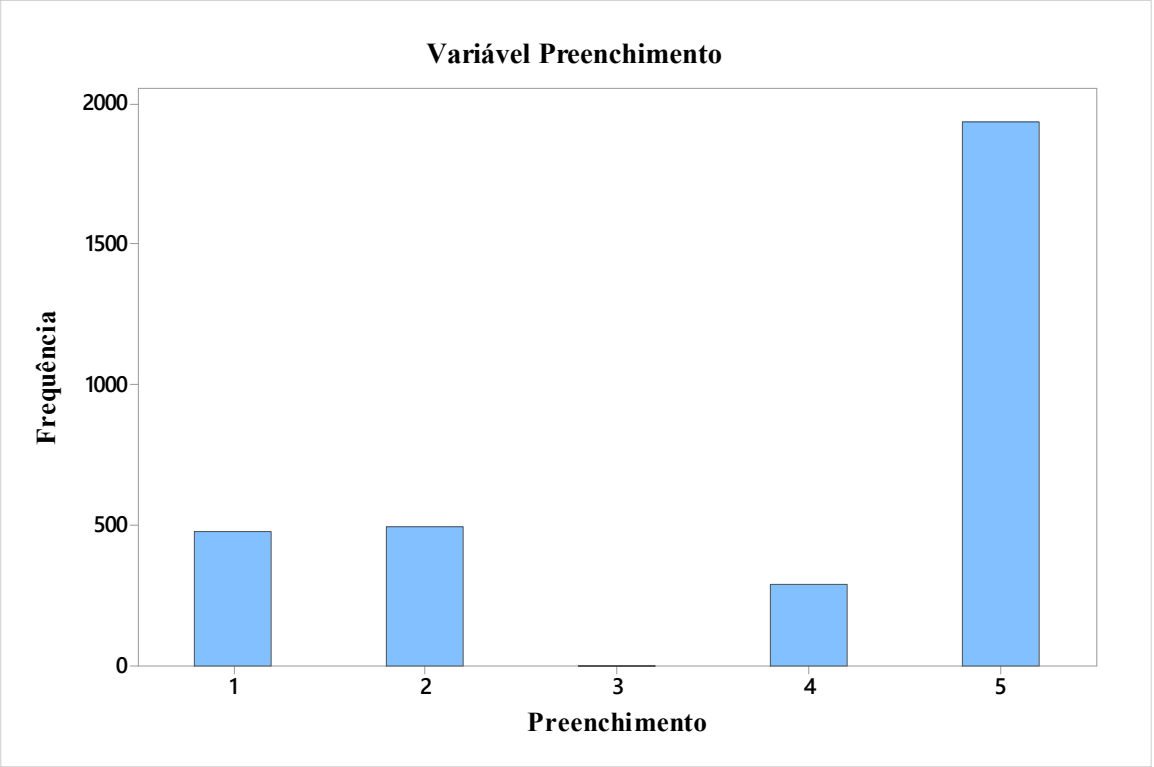


Figura A7 – Gráfico de barras para variável preenchimento.

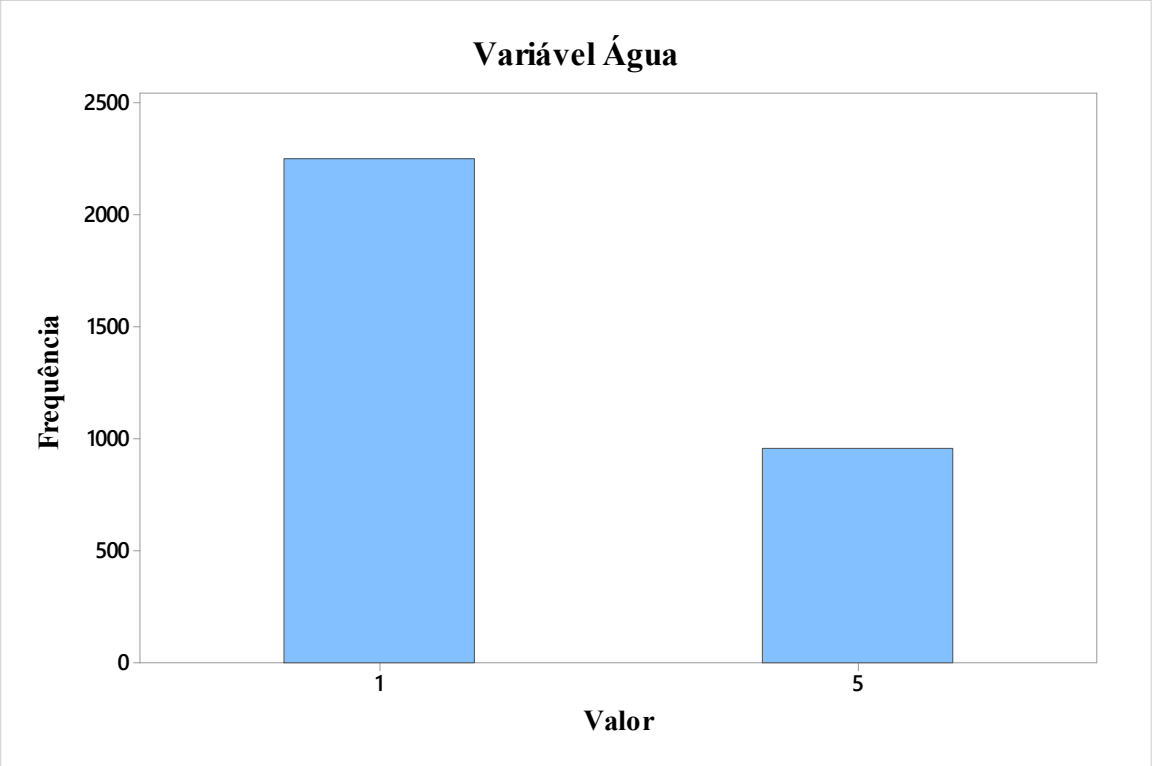


Figura A8 – Gráfico de barras para variável água.

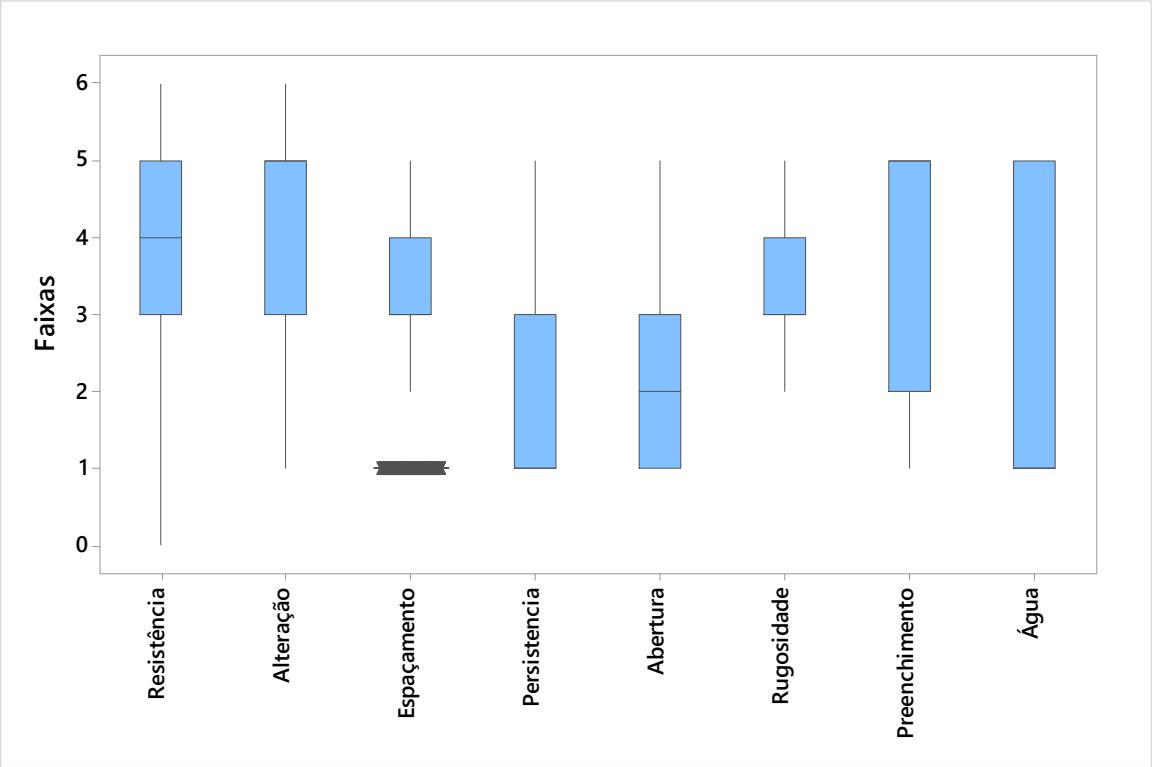


Figura A9 – Boxplot para variável resistência.

Apêndice B – Estatística geral para das variáveis para os grupos formados pelo método não-supervisionado

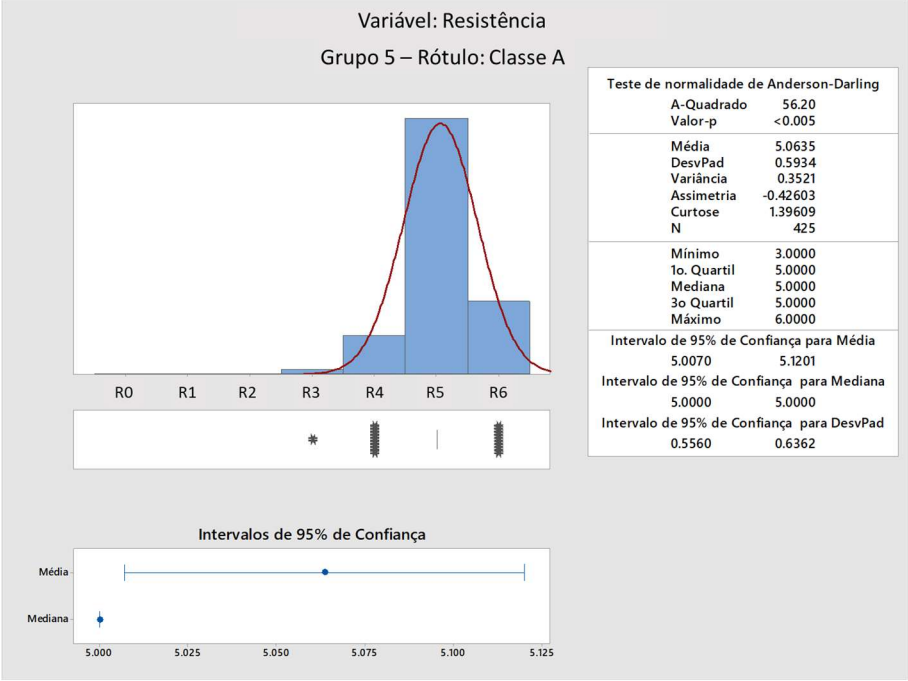


Figura B1 – Estatística geral, variável resistência, classe A.

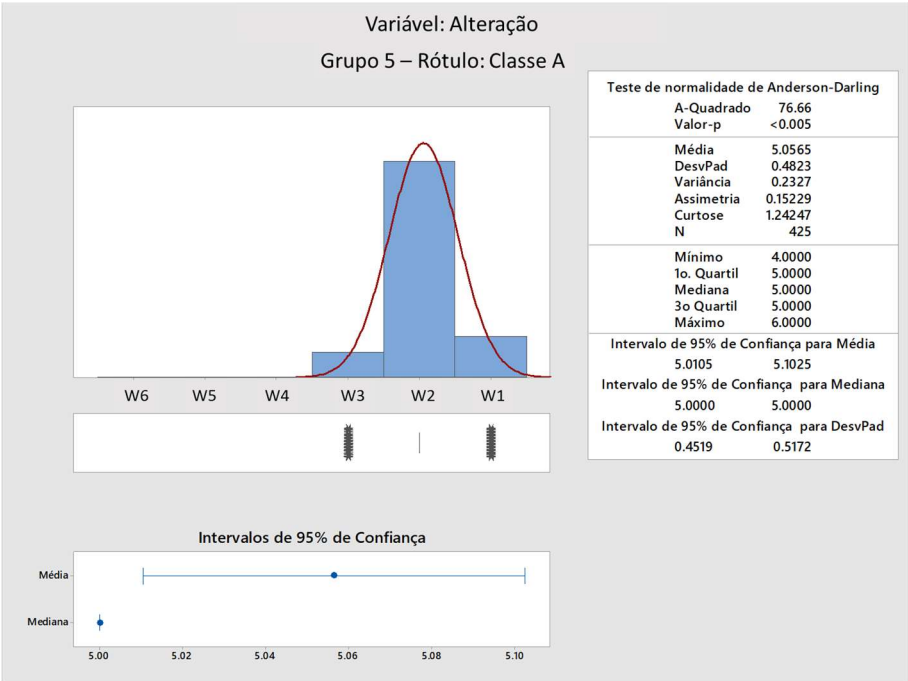


Figura B2 – Estatística geral, variável alteração, classe A.

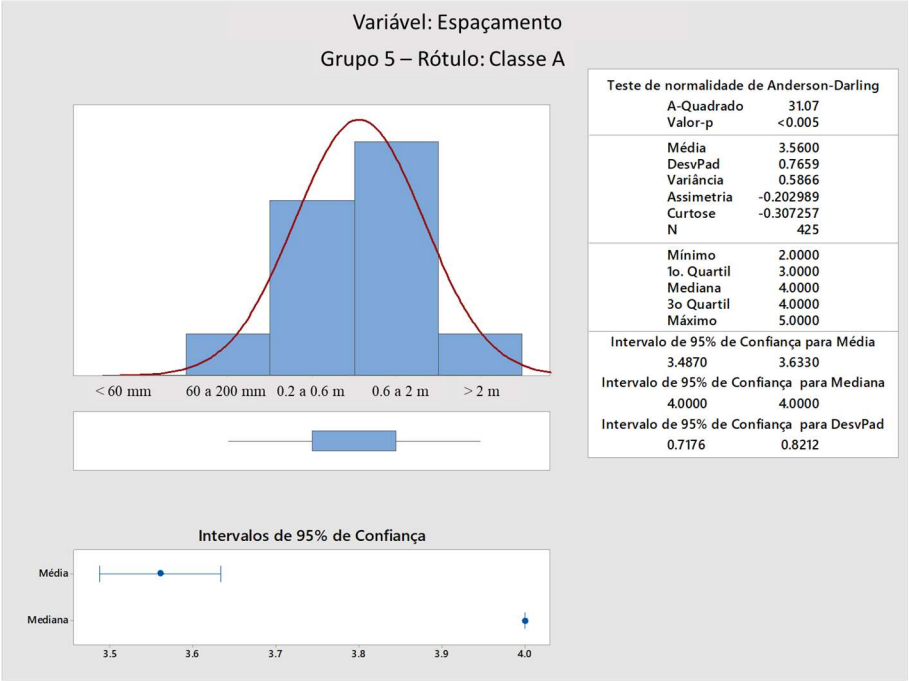


Figura B3 – Estatística geral, variável espaçamento, classe A.

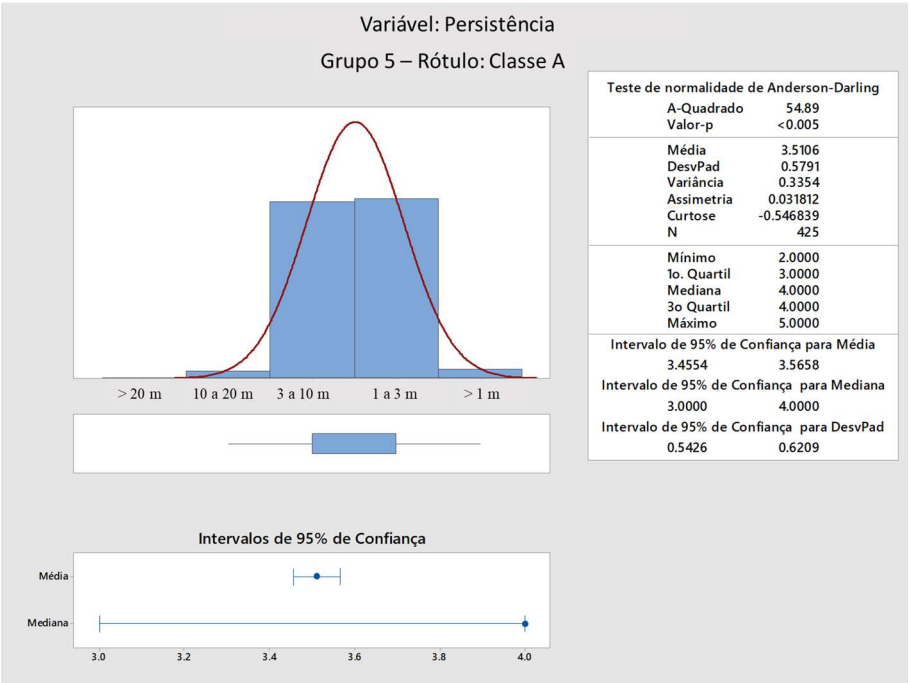


Figura B4 – Estatística geral, variável persistência, classe A.

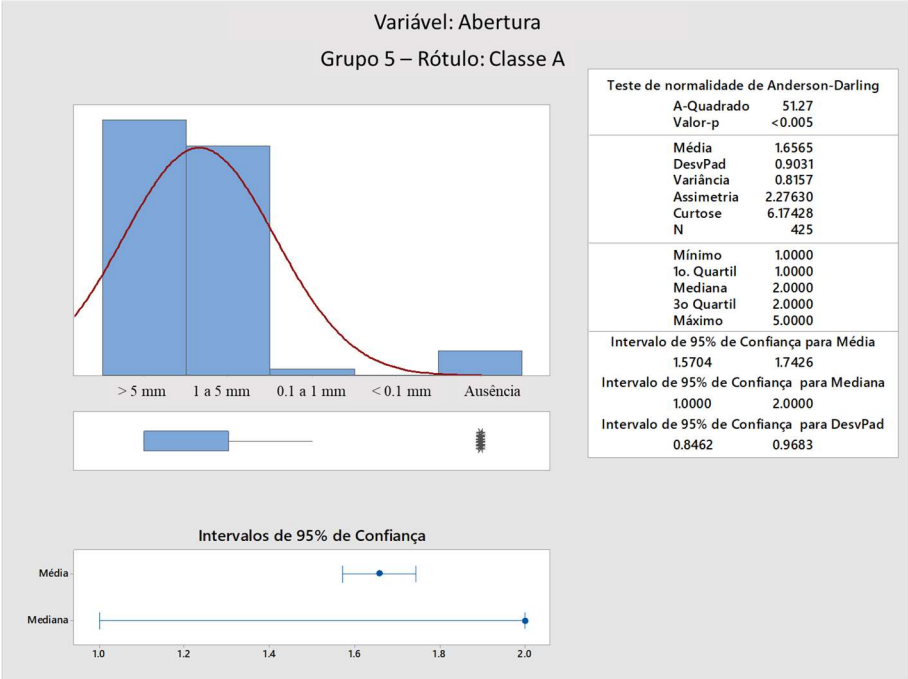


Figura B5 – Estatística geral, variável abertura, classe A.

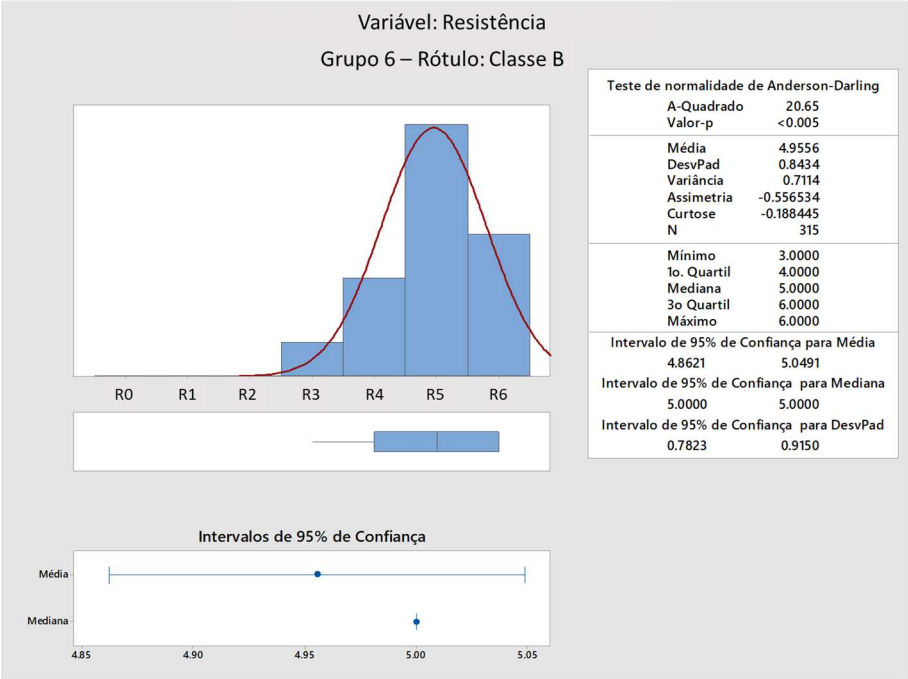
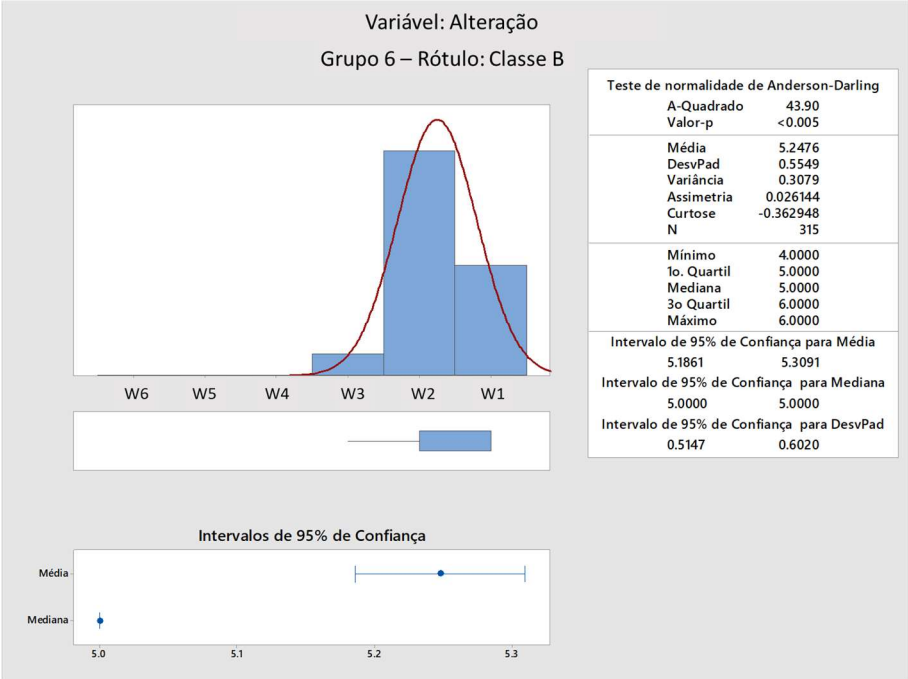
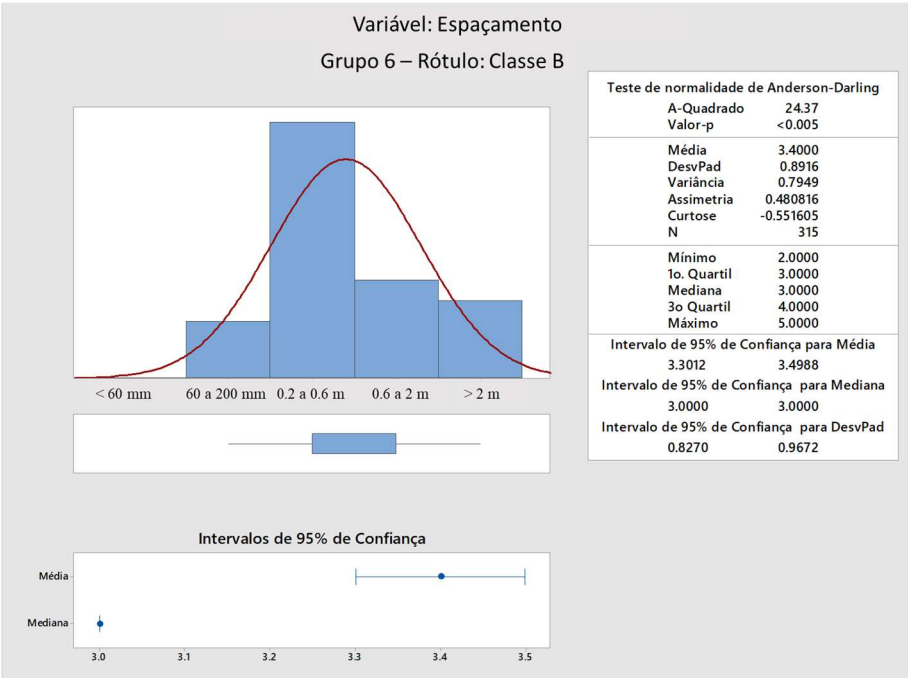


Figura B6 – Estatística geral, variável resistência, classe B.



Teste de normalidade de Anderson-Darling	
A-Quadrado	43.90
Valor-p	<0.005
Média	5.2476
DesvPad	0.5549
Variância	0.3079
Assimetria	0.026144
Curtose	-0.362948
N	315
Mínimo	4.0000
1o. Quartil	5.0000
Mediana	5.0000
3o Quartil	6.0000
Máximo	6.0000
Intervalo de 95% de Confiança para Média	
5.1861	5.3091
Intervalo de 95% de Confiança para Mediana	
5.0000	5.0000
Intervalo de 95% de Confiança para DesvPad	
0.5147	0.6020

Figura B7 – Estatística geral, variável alteração, classe B.



Teste de normalidade de Anderson-Darling	
A-Quadrado	24.37
Valor-p	<0.005
Média	3.4000
DesvPad	0.8916
Variância	0.7949
Assimetria	0.480816
Curtose	-0.551605
N	315
Mínimo	2.0000
1o. Quartil	3.0000
Mediana	3.0000
3o Quartil	4.0000
Máximo	5.0000
Intervalo de 95% de Confiança para Média	
3.3012	3.4988
Intervalo de 95% de Confiança para Mediana	
3.0000	3.0000
Intervalo de 95% de Confiança para DesvPad	
0.8270	0.9672

Figura B8 – Estatística geral, variável espaçamento, classe B.

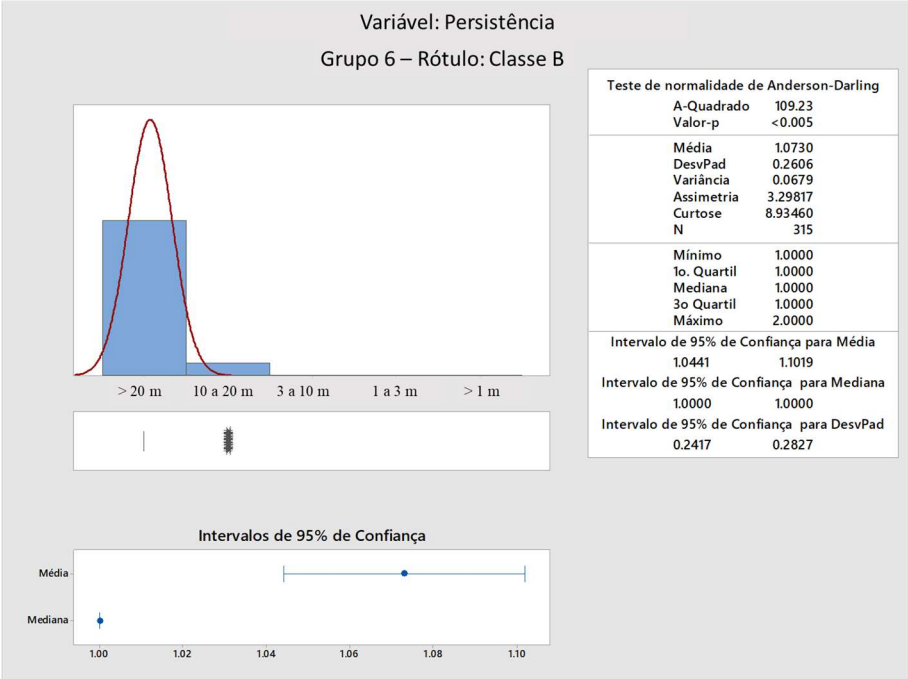


Figura B9 – Estatística geral, variável persistência, classe B.

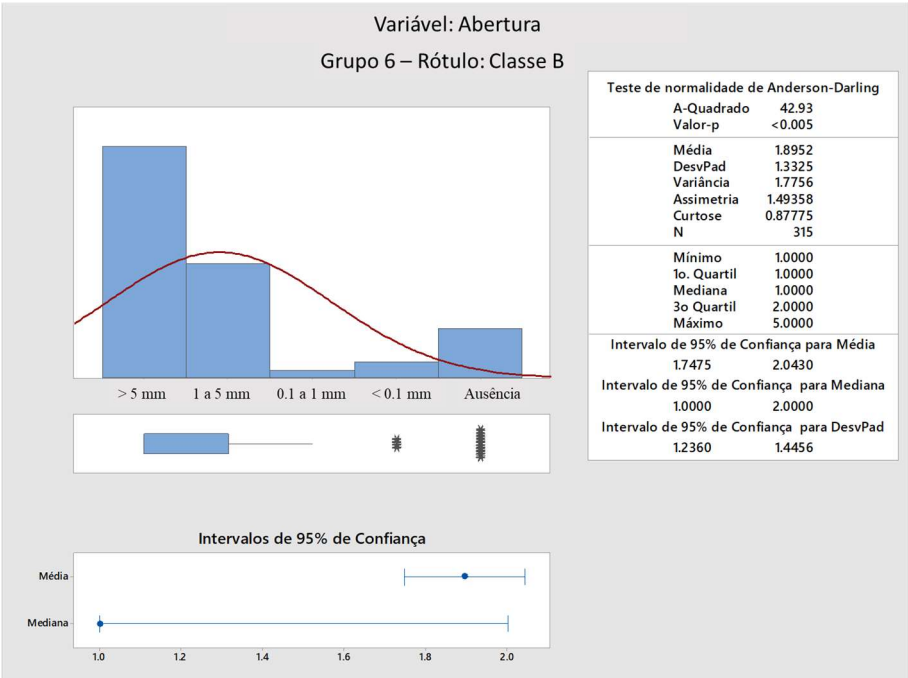


Figura B10 – Estatística geral, variável abertura, classe B.

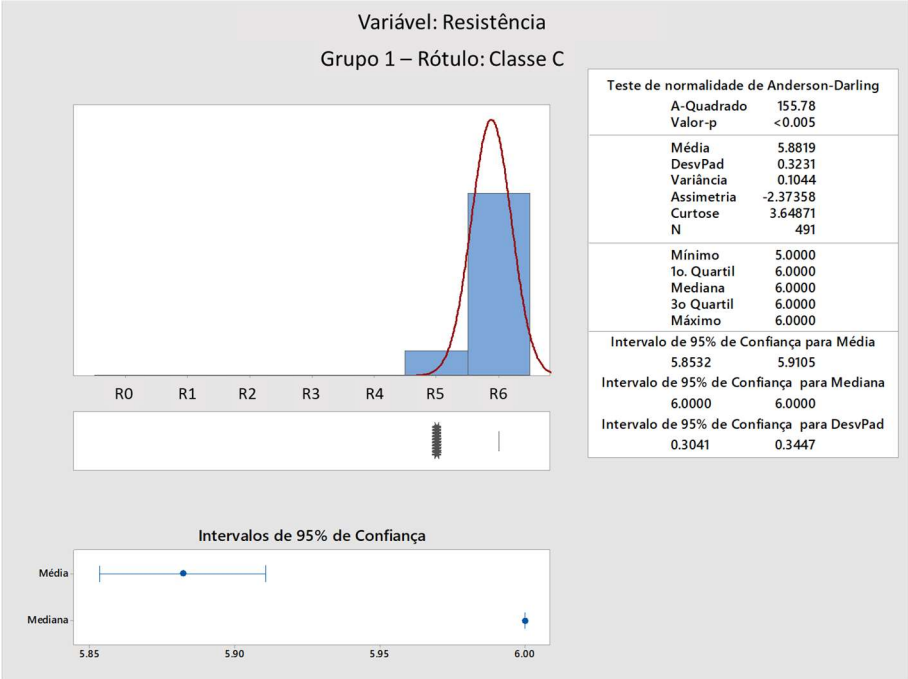


Figura B11 – Estatística geral, variável resistência, classe C.

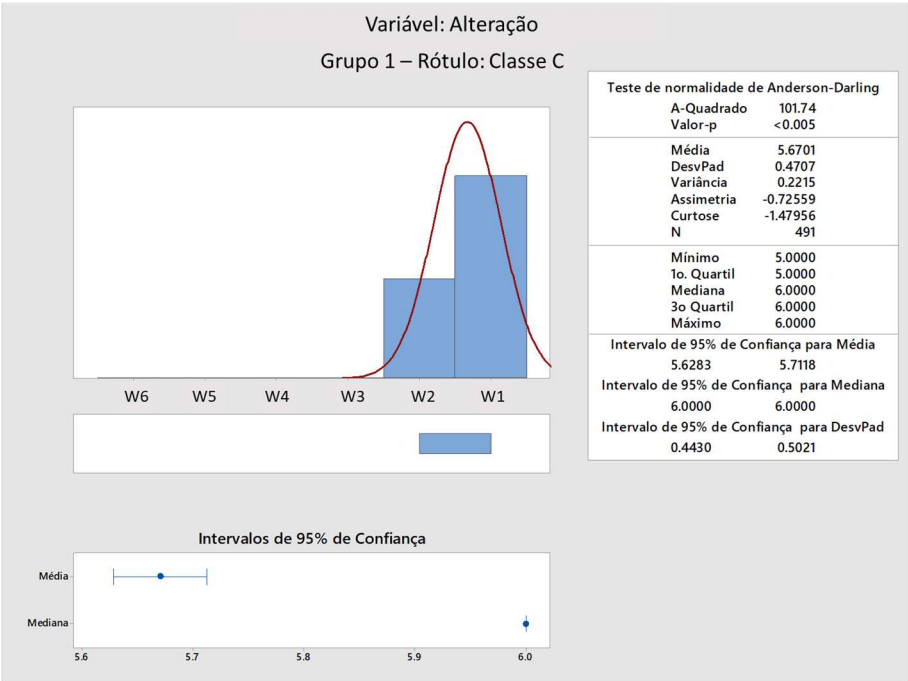


Figura B12 – Estatística geral, variável alteração, classe C.

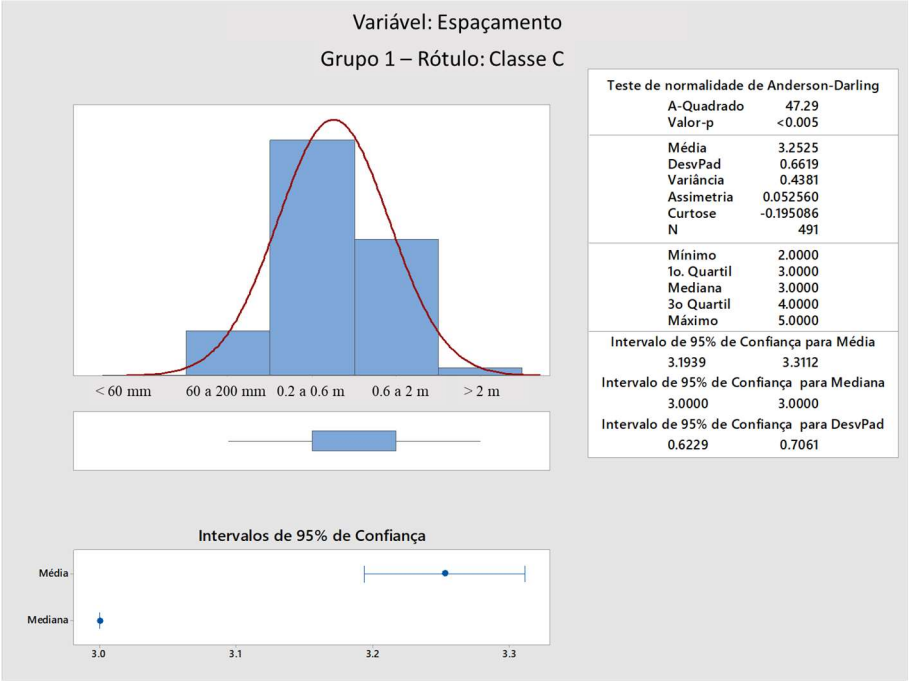


Figura B13 – Estatística geral, variável espaçamento, classe C.

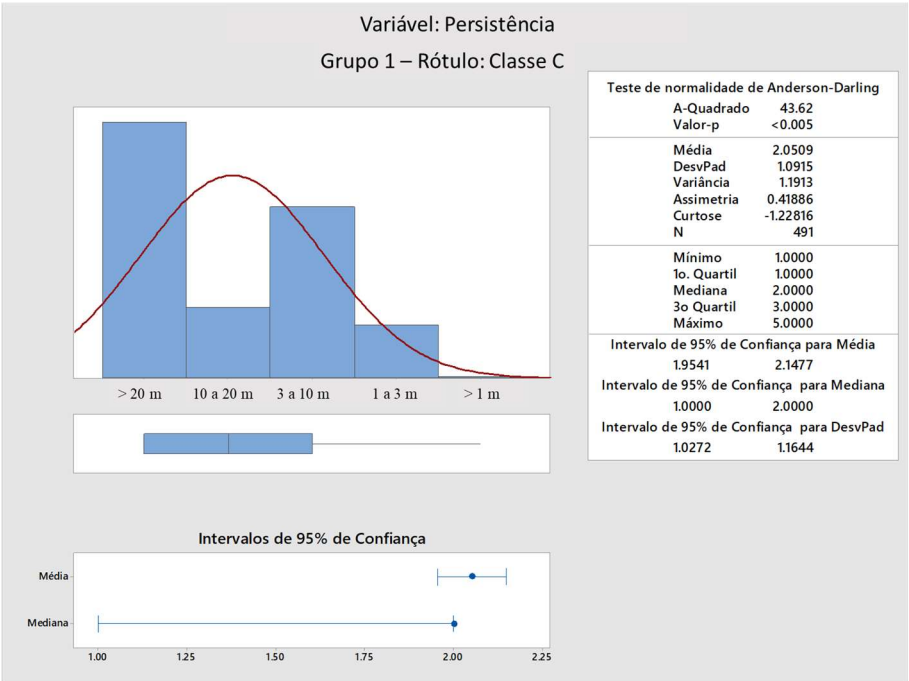


Figura B14 – Estatística geral, variável persistência, classe C.

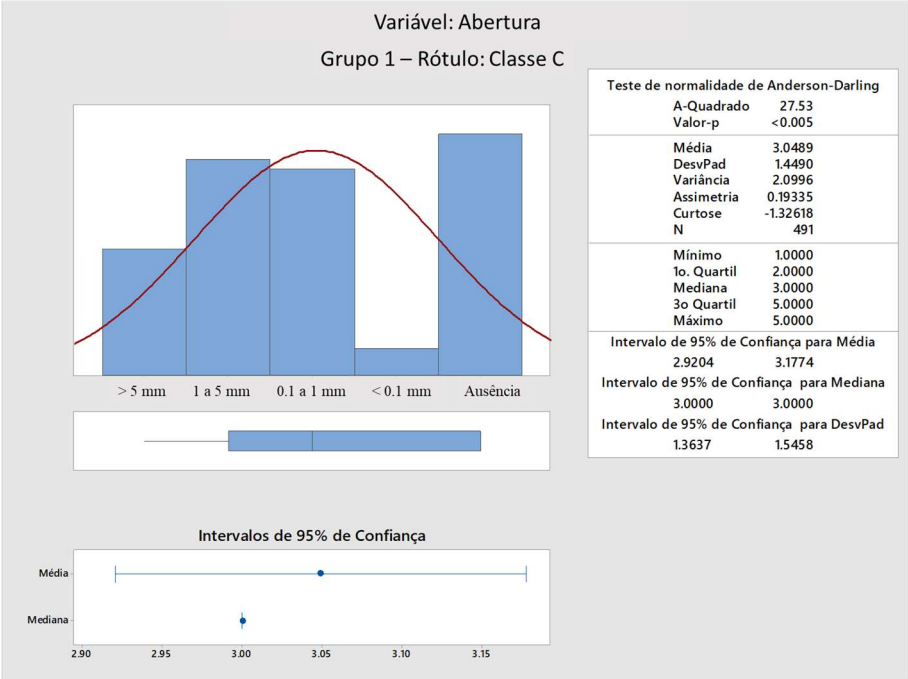


Figura B15 – Estatística geral, variável abertura, classe C.

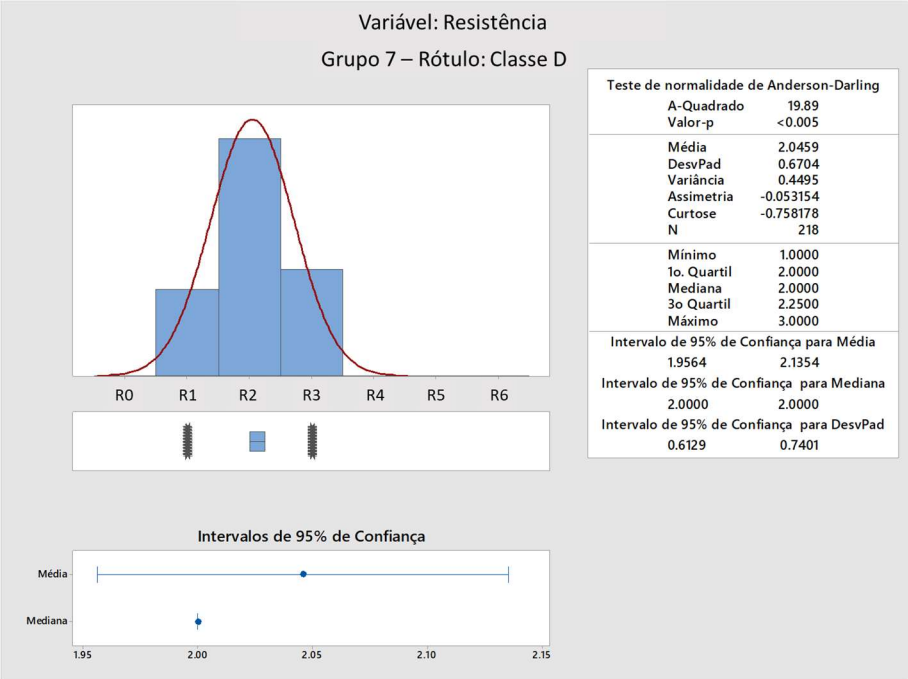


Figura B16 – Estatística geral, variável resistência, classe D.

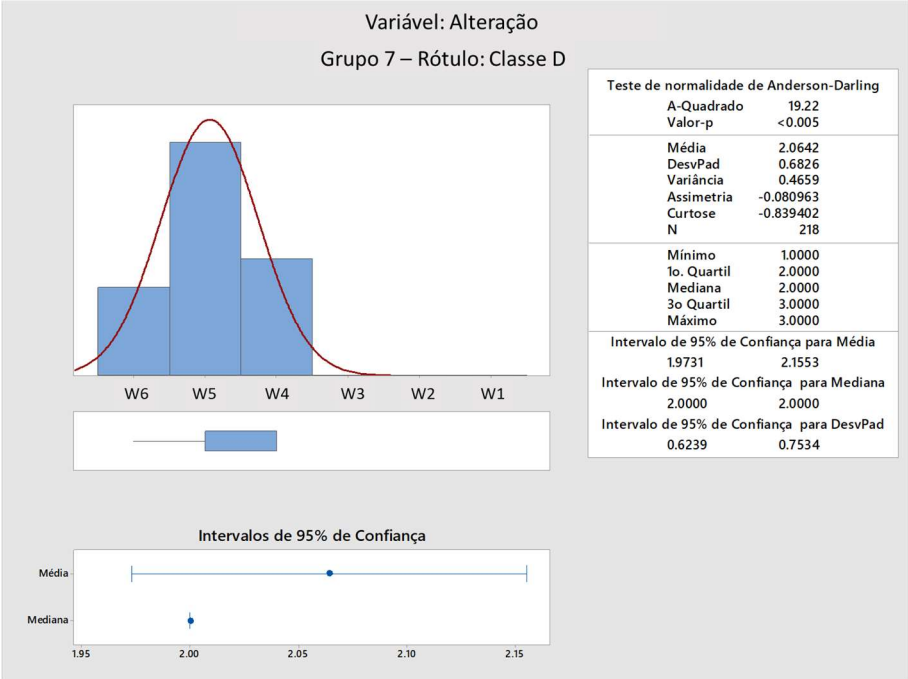


Figura B17 – Estatística geral, variável alteração, classe D.

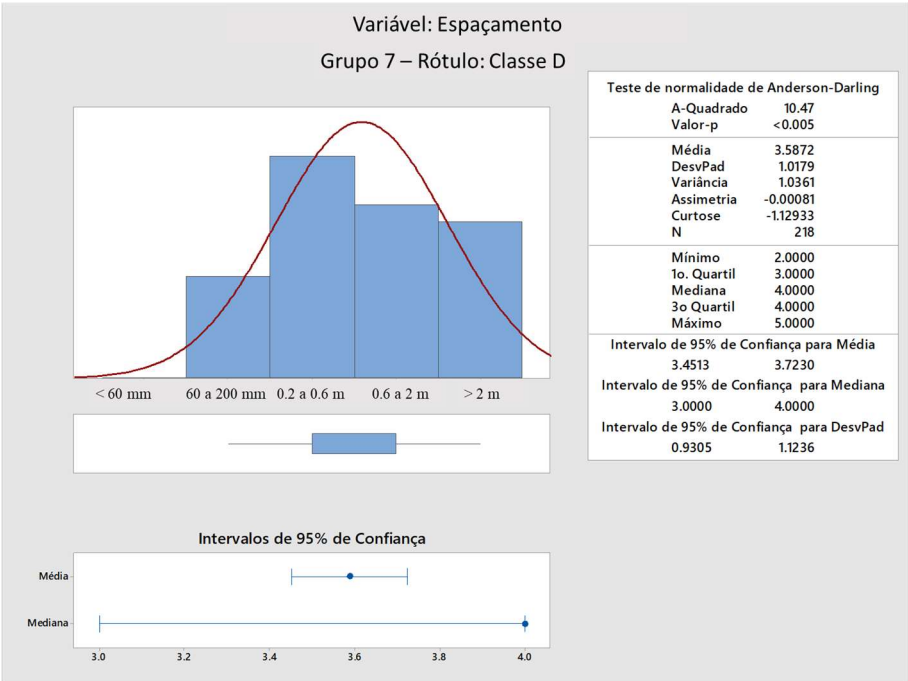
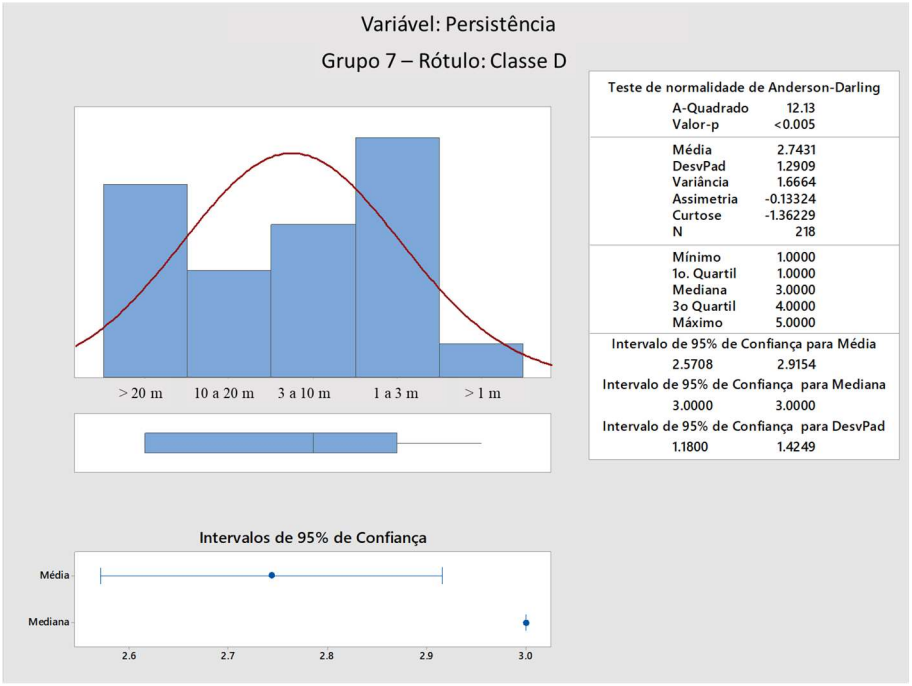
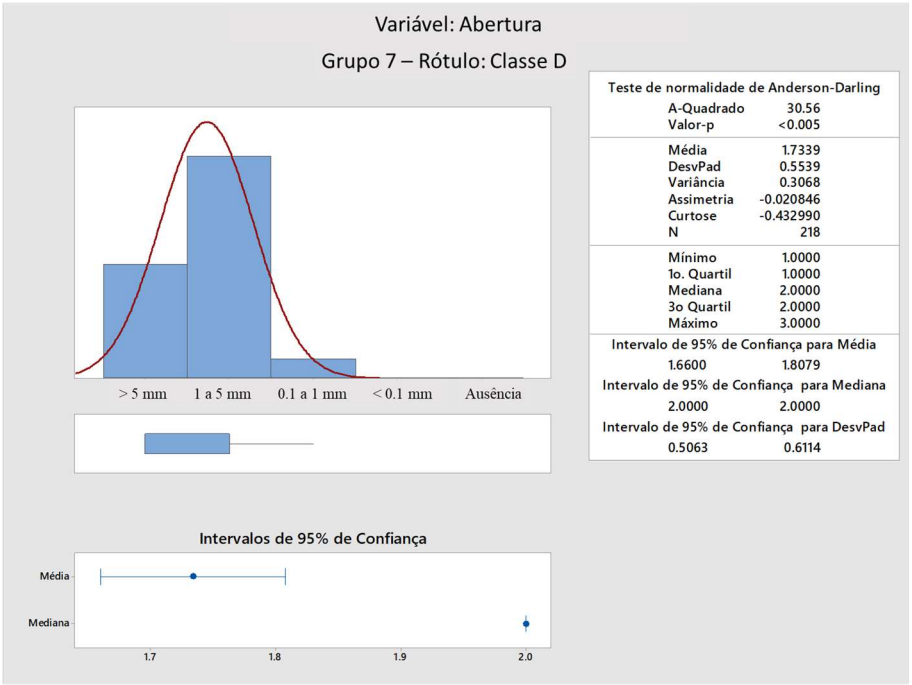


Figura B20 – Estatística geral, variável espaçamento, classe D.



Teste de normalidade de Anderson-Darling	
A-Quadrado	12.13
Valor-p	<0.005
Média	2.7431
DesvPad	1.2909
Variância	1.6664
Assimetria	-0.13324
Curtose	-1.36229
N	218
Mínimo	1.0000
1o. Quartil	1.0000
Mediana	3.0000
3o Quartil	4.0000
Máximo	5.0000
Intervalo de 95% de Confiança para Média	
2.5708	2.9154
Intervalo de 95% de Confiança para Mediana	
3.0000	3.0000
Intervalo de 95% de Confiança para DesvPad	
1.1800	1.4249

Figura B21 – Estatística geral, variável persistência, classe D.



Teste de normalidade de Anderson-Darling	
A-Quadrado	30.56
Valor-p	<0.005
Média	1.7339
DesvPad	0.5539
Variância	0.3068
Assimetria	-0.020846
Curtose	-0.432990
N	218
Mínimo	1.0000
1o. Quartil	1.0000
Mediana	2.0000
3o Quartil	2.0000
Máximo	3.0000
Intervalo de 95% de Confiança para Média	
1.6600	1.8079
Intervalo de 95% de Confiança para Mediana	
2.0000	2.0000
Intervalo de 95% de Confiança para DesvPad	
0.5063	0.6114

Figura B22 – Estatística geral, variável abertura, classe D.

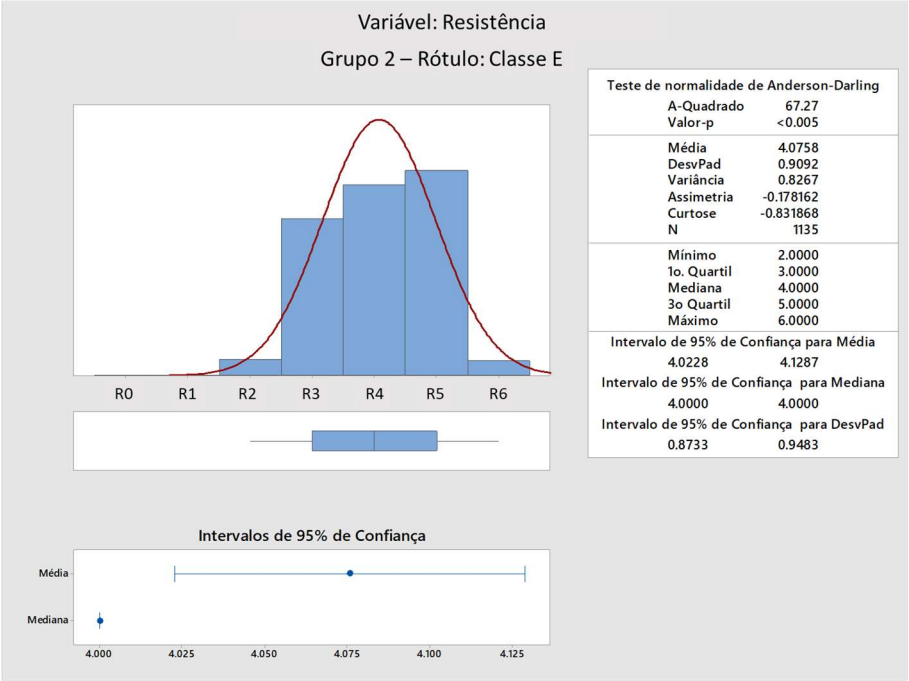


Figura B23 – Estatística geral, variável resistência, classe E.

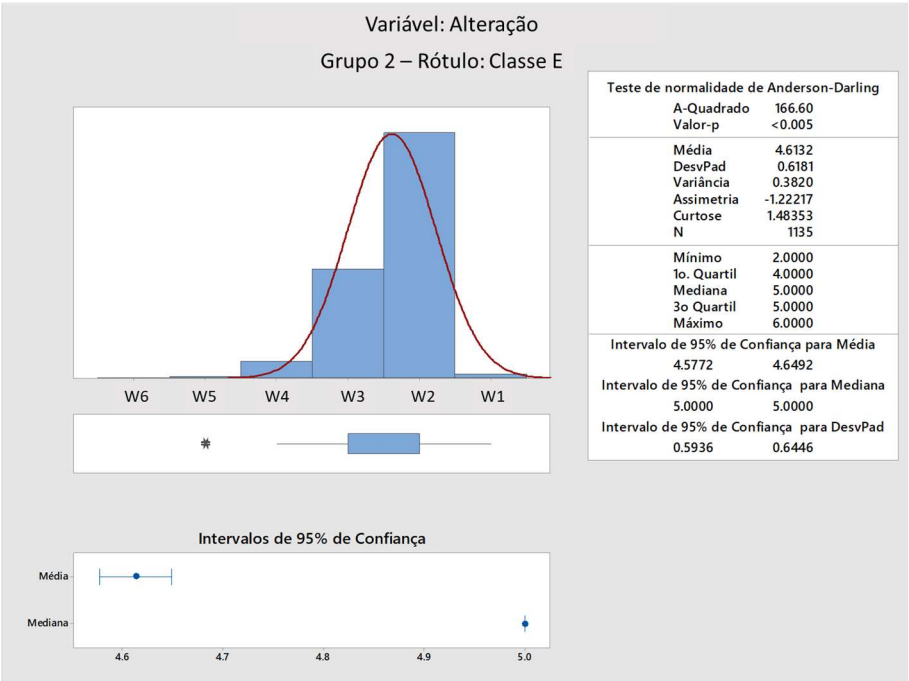


Figura B24 – Estatística geral, variável alteração, classe E.

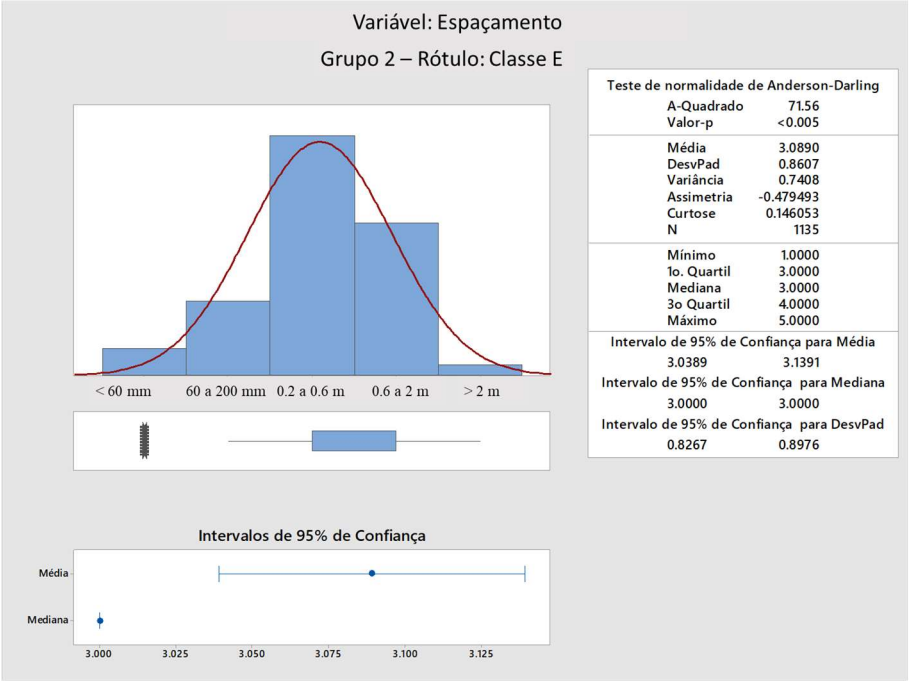


Figura B25 – Estatística geral, variável espaçamento, classe E.

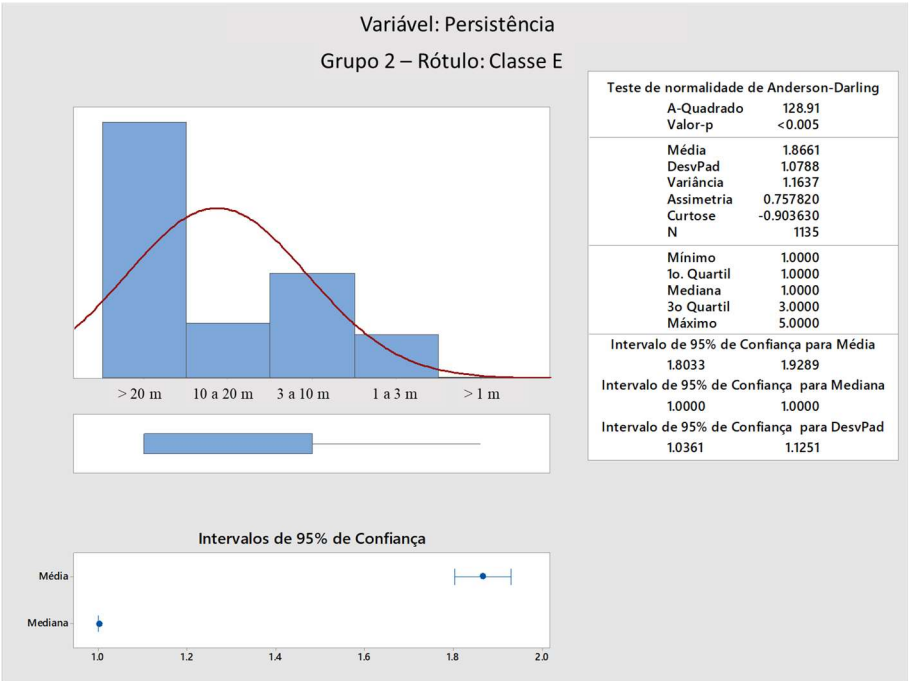


Figura B26 – Estatística geral, variável persistência, classe E.

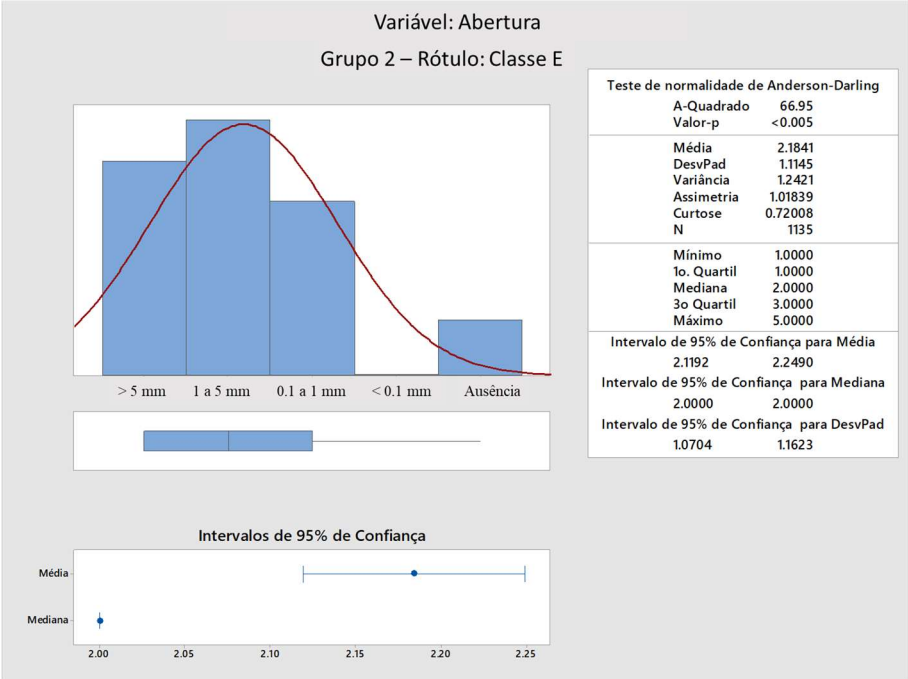


Figura B27 – Estatística geral, variável abertura, classe E.

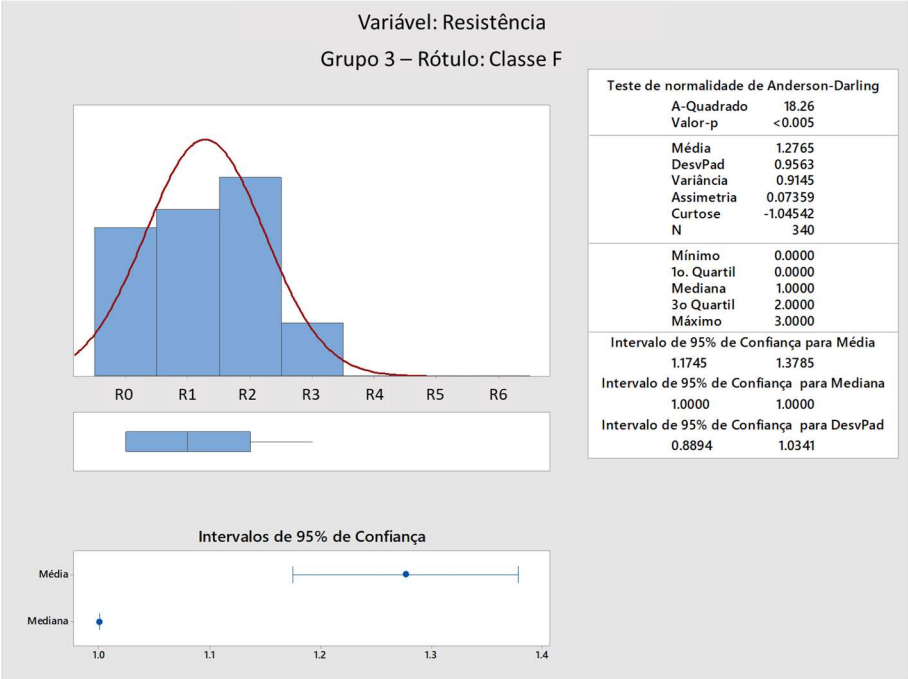
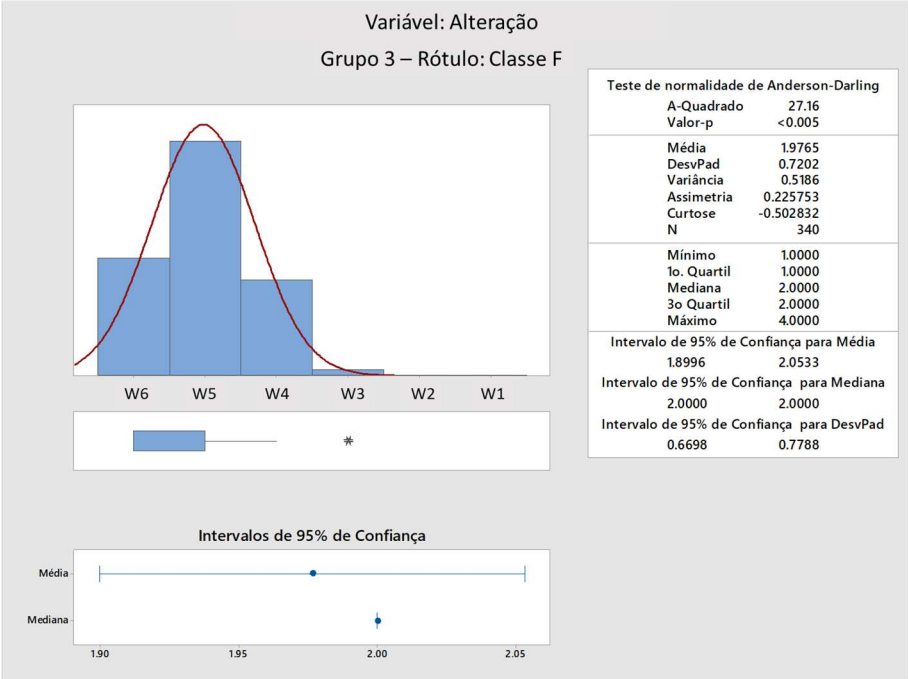
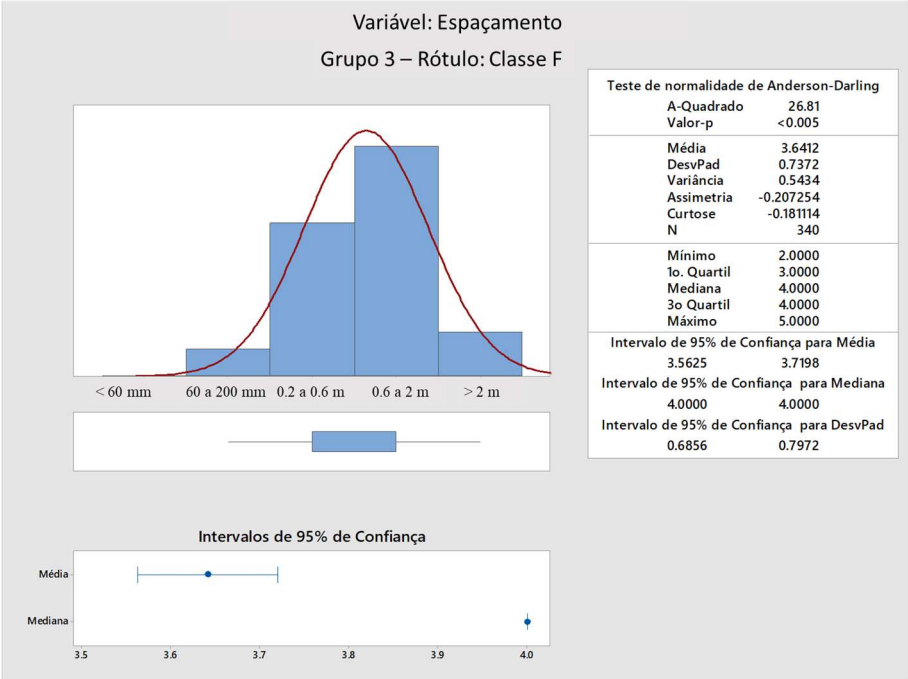


Figura B28 – Estatística geral, variável resistência, classe F.



Teste de normalidade de Anderson-Darling	
A-Quadrado	27.16
Valor-p	<0.005
Média	1.9765
DesvPad	0.7202
Variância	0.5186
Assimetria	0.225753
Curtose	-0.502832
N	340
Mínimo	1.0000
1o. Quartil	1.0000
Mediana	2.0000
3o Quartil	2.0000
Máximo	4.0000
Intervalo de 95% de Confiança para Média	
1.8996	2.0533
Intervalo de 95% de Confiança para Mediana	
2.0000	2.0000
Intervalo de 95% de Confiança para DesvPad	
0.6698	0.7788

Figura B29 – Estatística geral, variável alteração, classe F.



Teste de normalidade de Anderson-Darling	
A-Quadrado	26.81
Valor-p	<0.005
Média	3.6412
DesvPad	0.7372
Variância	0.5434
Assimetria	-0.207254
Curtose	-0.181114
N	340
Mínimo	2.0000
1o. Quartil	3.0000
Mediana	4.0000
3o Quartil	4.0000
Máximo	5.0000
Intervalo de 95% de Confiança para Média	
3.5625	3.7198
Intervalo de 95% de Confiança para Mediana	
4.0000	4.0000
Intervalo de 95% de Confiança para DesvPad	
0.6856	0.7972

Figura B30 – Estatística geral, variável espaçamento, classe F.

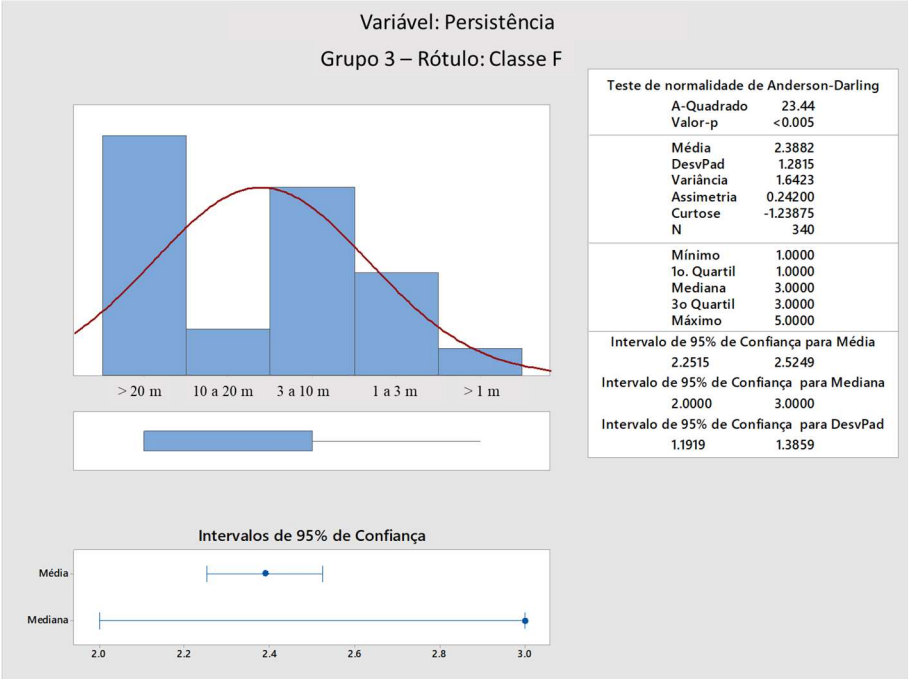


Figura B31 – Estatística geral, variável persistência, classe F.

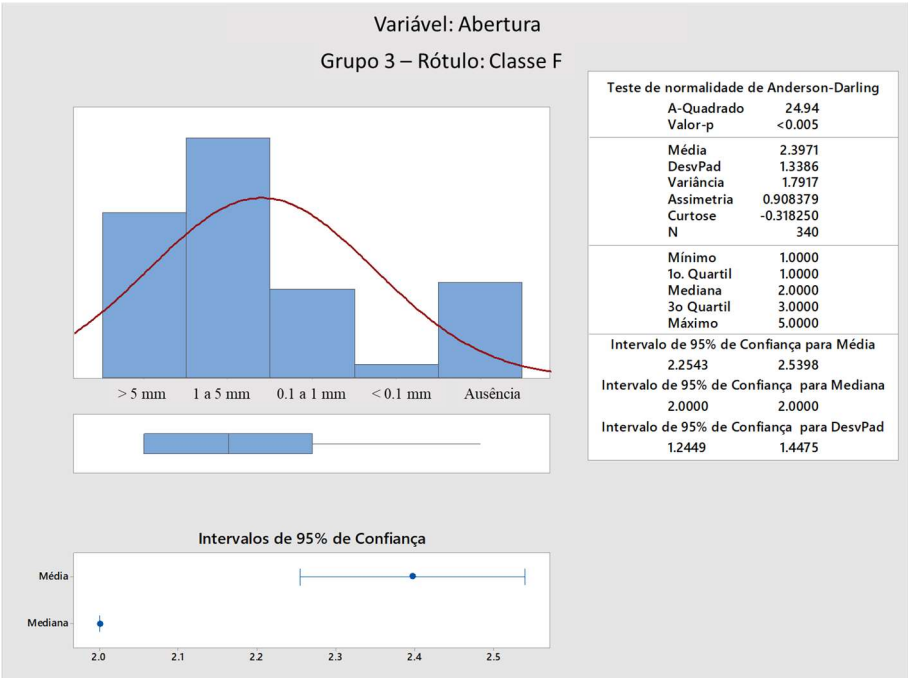
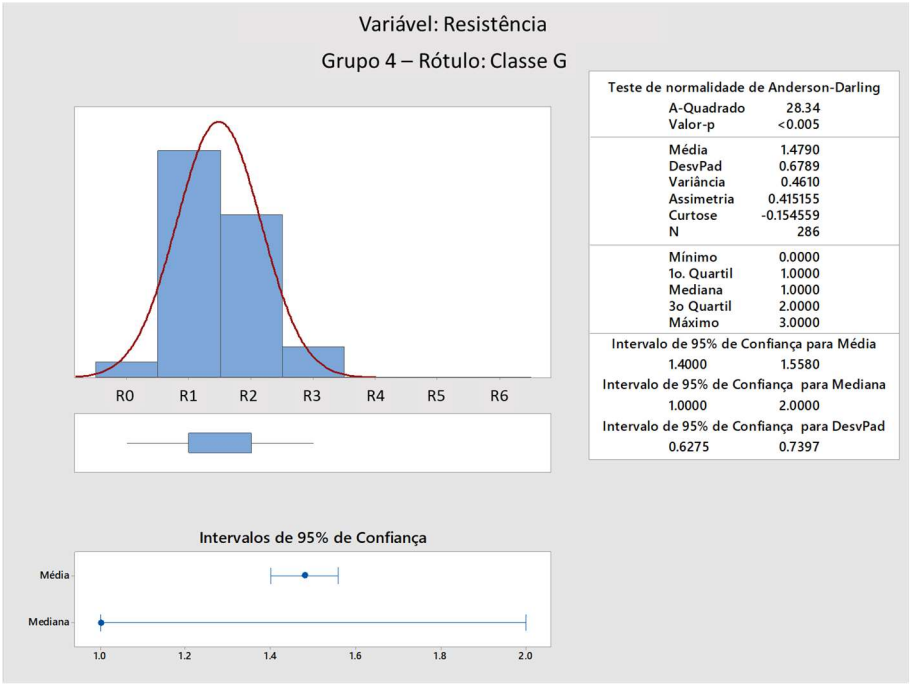
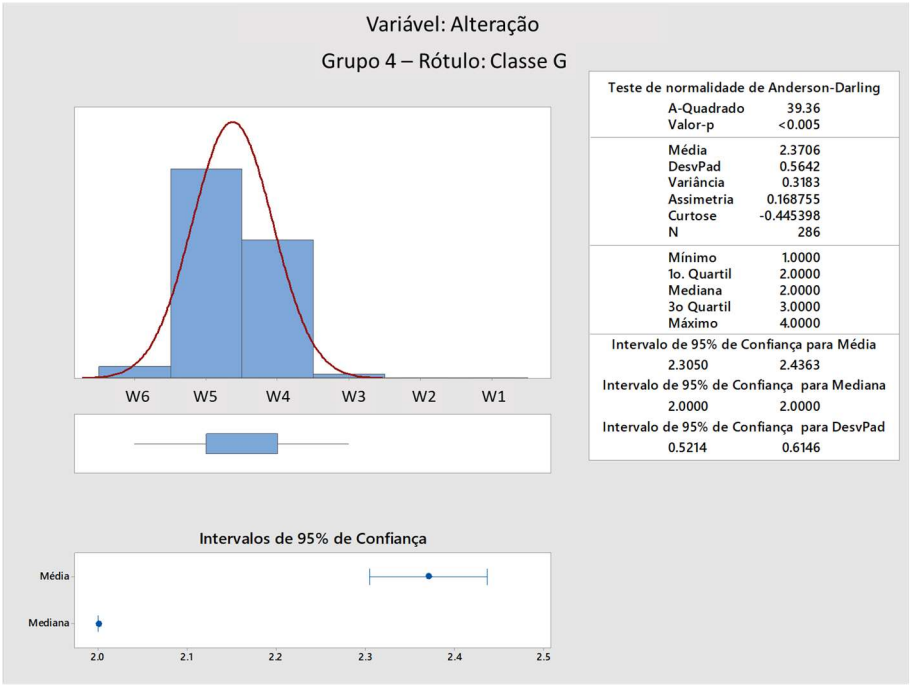


Figura B32 – Estatística geral, variável abertura, classe F.



Teste de normalidade de Anderson-Darling	
A-Quadrado	28.34
Valor-p	<0.005
Média	1.4790
DesvPad	0.6789
Variância	0.4610
Assimetria	0.415155
Curtose	-0.154559
N	286
Mínimo	0.0000
1o. Quartil	1.0000
Mediana	1.0000
3o Quartil	2.0000
Máximo	3.0000
Intervalo de 95% de Confiança para Média	
1.4000	1.5580
Intervalo de 95% de Confiança para Mediana	
1.0000	2.0000
Intervalo de 95% de Confiança para DesvPad	
0.6275	0.7397

Figura B33 – Estatística geral, variável resistência, classe G.



Teste de normalidade de Anderson-Darling	
A-Quadrado	39.36
Valor-p	<0.005
Média	2.3706
DesvPad	0.5642
Variância	0.3183
Assimetria	0.168755
Curtose	-0.445398
N	286
Mínimo	1.0000
1o. Quartil	2.0000
Mediana	2.0000
3o Quartil	3.0000
Máximo	4.0000
Intervalo de 95% de Confiança para Média	
2.3050	2.4363
Intervalo de 95% de Confiança para Mediana	
2.0000	2.0000
Intervalo de 95% de Confiança para DesvPad	
0.5214	0.6146

Figura B34 – Estatística geral, variável alteração, classe G.

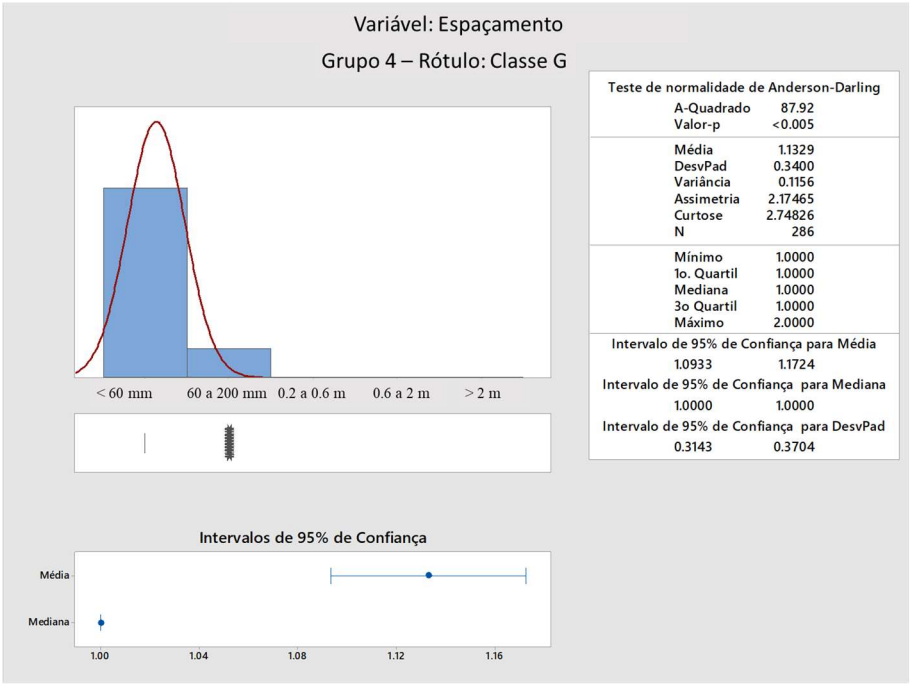


Figura B35 – Estatística geral, variável espaçamento, classe G.

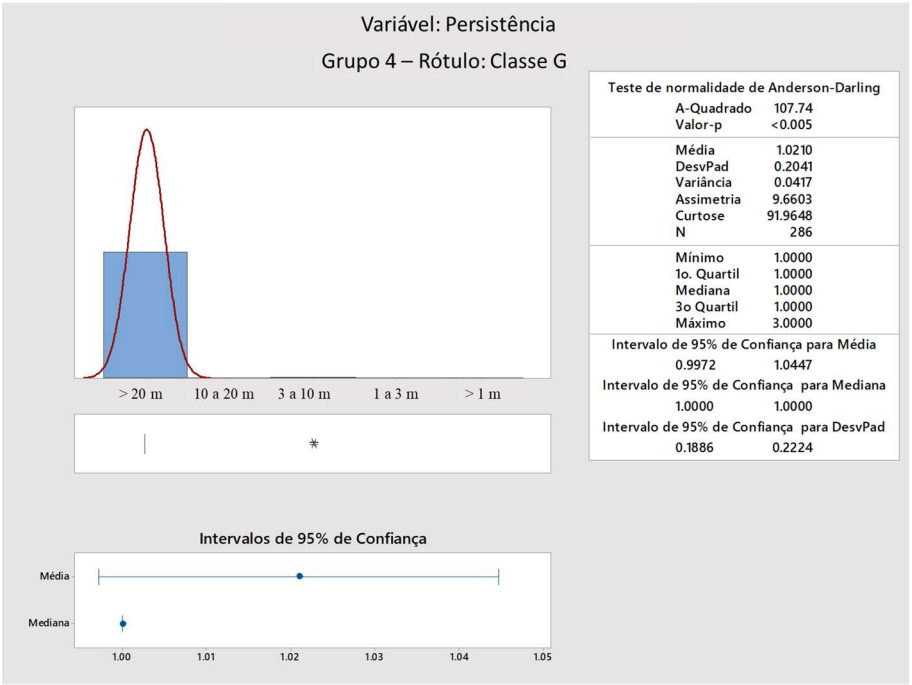


Figura B36 – Estatística geral, variável persistência, classe G.

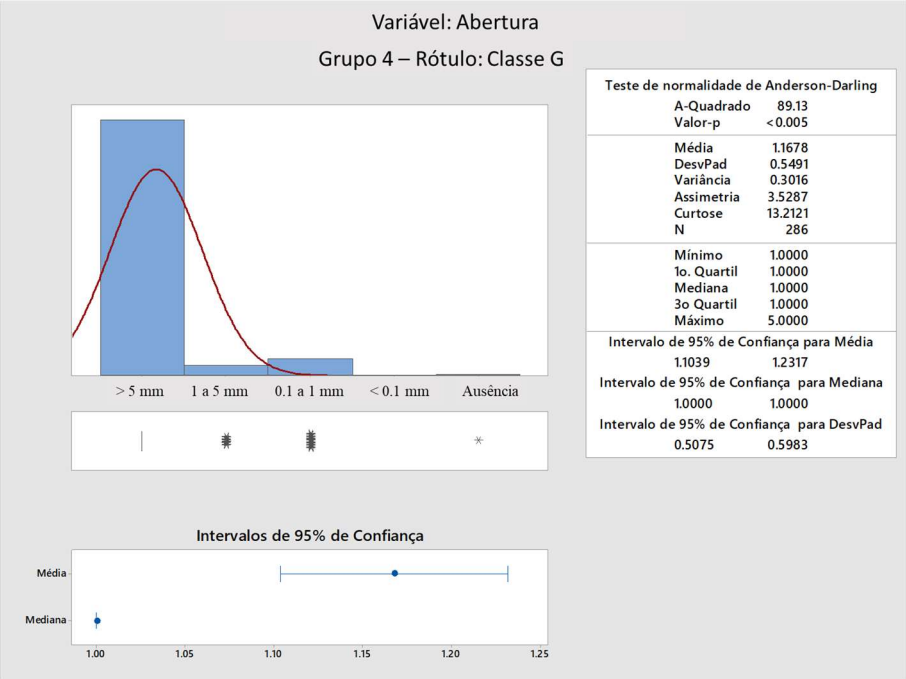


Figura B37 – Estatística geral, variável abertura, classe G.

Apêndice C – Script para Naive Bayes

```
library(e1071)

library(UBL)

dados_1 <- read.csv2("banco_total.csv",header=TRUE,dec = ".")

dim(dados_1)

head(dados_1)

dados = dados_1[,2:8]

dados$resistencia <- as.factor(dados$resistencia)

dados$alteracao <- as.factor(dados$alteracao)

dados$espacamento <- as.factor(dados$espacamento)

dados$persistencia <- as.factor(dados$persistencia)

dados$abertura <- as.factor(dados$abertura)

dados$agua <- as.factor(dados$agua)

dados_balanceados <- SmoteClassif(classificacao ~.,
                                  dados,
                                  C.perc = "balance",
                                  k = 5,
                                  repl = FALSE,
                                  dist = "Overlap")

summary(dados_1$classificacao)

summary(dados_balanceados$classificacao)
```

```
train_idx <- sample(nrow(dados_balanceados), 2/3 * nrow(dados_balanceados))

dados_train <- dados_balanceados[train_idx, ]

dados_test <- dados_balanceados[-train_idx, ]

nb_classifier <- naiveBayes(dados_train[,-7], dados_train$classificacao)

sms_train_pred <- predict(nb_classifier, dados_train[,-7])

sms_train_pred <- as.factor(sms_train_pred)

resultado_naive_bayes_train <- confusionMatrix(sms_train_pred, dados_train$classificacao)

curva_roc_naive_bayes_train <- multiclass.roc(response = dados_train$classificacao, predictor
= as.numeric(as.factor(sms_train_pred)))

sms_test_pred <- predict(nb_classifier, dados_test[,-7])

sms_test_pred <- as.factor(sms_test_pred)

resultado_naive_bayes_test <- confusionMatrix(sms_test_pred, dados_test$classificacao)

curva_roc_naive_bayes_test <- multiclass.roc(response = dados_test$classificacao, predictor =
as.numeric(as.factor(sms_test_pred)))

View(resultado_naive_bayes_test$byClass)

acuracia_naive_bayes_train <- resultado_naive_bayes_train$overall['Accuracy']

lower_acuracia_naive_bayes_train <- resultado_naive_bayes_train$overall['AccuracyLower']

upper_acuracia_naive_bayes_train <- resultado_naive_bayes_train$overall['AccuracyUpper']

kappa_acuracia_naive_bayes_train <- resultado_naive_bayes_train$overall['Kappa']

pvalor_acuracia_naive_bayes_train <-
resultado_naive_bayes_train$overall['AccuracyPValue']
```

```
auc_naive_bayes_train <- curva_roc_naive_bayes_train$auc

vetor_modelo_train_decision_tree <- c("Naive Bayes - Desempenho amostra de treino",
                                      round(acuracia_naive_bayes_train,3),
                                      round(lower_acuracia_naive_bayes_train,3),
                                      round(upper_acuracia_naive_bayes_train,3),
                                      round(kappa_acuracia_naive_bayes_train,3),
                                      round(auc_naive_bayes_train,3),
                                      round(pvalor_acuracia_naive_bayes_train,10^20))

acuracia_naive_bayes_test <- resultado_naive_bayes_test$overall['Accuracy']

lower_acuracia_naive_bayes_test <- resultado_naive_bayes_test$overall['AccuracyLower']

upper_acuracia_naive_bayes_test <- resultado_naive_bayes_test$overall['AccuracyUpper']

kappa_acuracia_naive_bayes_test <- resultado_naive_bayes_test$overall['Kappa']

pvalor_acuracia_naive_bayes_test <- resultado_naive_bayes_test$overall['AccuracyPValue']

auc_naive_bayes_test <- curva_roc_naive_bayes_test$auc

vetor_modelo_test_decision_tree <- c("Naive Bayes - Desempenho amostra de teste",
                                     round(acuracia_naive_bayes_test,3),
                                     round(lower_acuracia_naive_bayes_test,3),
                                     round(upper_acuracia_naive_bayes_test,3),
                                     round(kappa_acuracia_naive_bayes_test,3),
                                     round(auc_naive_bayes_test,3),
                                     round(pvalor_acuracia_naive_bayes_test,10^20))
```

```
compara_modelos <- rbind(vetor_modelo_train_decision_tree,
                         vetor_modelo_test_decision_tree)
rownames(compara_modelos) <- c("Naive Bayes - Desempenho amostra de treino",
                               "Naive Bayes - Desempenho amostra de teste")
colnames(compara_modelos) <- c("Modelo",
                               "Acuracia",
                               "Intervalo inferior de confiança - Acuracia",
                               "Intervalo superior de confiança - Acuracia",
                               "kappa",
                               "indice-auc",
                               "p-Value")
compara_modelos <- as.data.frame(compara_modelos)
View(compara_modelos)
```

Apêndice D – Script para Random Forest

```
library(randomForest)

library(rpart)

library(rpart.plot)

library(UBL)

dados_1 <- read.csv2("banco_total.csv",header=TRUE,dec = ".")

dim(dados_1)

head(dados_1)

dados = dados_1[,2:8]

dados$resistencia <- as.factor(dados$resistencia)

dados$alteracao <- as.factor(dados$alteracao)

dados$espacamento <- as.factor(dados$espacamento)

dados$persistencia <- as.factor(dados$persistencia)

dados$abertura <- as.factor(dados$abertura)

dados$agua <- as.factor(dados$agua)

dados_balanceados <- SmoteClassif(classificacao ~.,

                                  dados,

                                  C.perc = "balance",

                                  k = 5,

                                  repl = FALSE,

                                  dist = "Overlap")
```

```
dados_balanceados$resistencia <- as.numeric(dados_balanceados$resistencia)

dados_balanceados$alteracao <- as.numeric(dados_balanceados$alteracao)

dados_balanceados$espacamento <- as.numeric(dados_balanceados$espacamento)

dados_balanceados$persistencia <- as.numeric(dados_balanceados$persistencia)

dados_balanceados$abertura <- as.numeric(dados_balanceados$abertura)

dados_balanceados$agua <- as.numeric(dados_balanceados$agua)

train_idx <- sample(nrow(dados_balanceados), 2/3 * nrow(dados_balanceados))

dados_train <- dados_balanceados[train_idx, ]

dados_test <- dados_balanceados[-train_idx, ]

## criando o modelo de RandomForest ##

modelo <- randomForest(dados_train[-7], dados_train$classificacao, ntree = 100)

## validação externa do modelo de RandomForest ##

modelo_pred_train <- predict(modelo, dados_train)

resultado_random_forest_train <- confusionMatrix(modelo_pred_train, dados_train$classificacao)

curva_roc_random_forest_train <- multiclass.roc(response = dados_train$classificacao, predictor = as.numeric(as.factor(modelo_pred_train)))

modelo_pred_test <- predict(modelo, dados_test)

resultado_random_forest_test <- confusionMatrix(modelo_pred_test, dados_test$classificacao)
```

```
curva_roc_random_forest_test <- multiclass.roc(response = dados_test$classificacao, predictor
= as.numeric(as.factor(modelo_pred_test)))

##View(resultado_random_forest_test$byClass)

acuracia_random_forest_train <- resultado_random_forest_train$overall['Accuracy']

lower_acuracia_random_forest_train <-
resultado_random_forest_train$overall['AccuracyLower']

upper_acuracia_random_forest_train <-
resultado_random_forest_train$overall['AccuracyUpper']

kappa_acuracia_random_forest_train <- resultado_random_forest_train$overall['Kappa']

pvalor_acuracia_random_forest_train <-
resultado_random_forest_train$overall['AccuracyPValue']

auc_random_forest_train <- curva_roc_random_forest_train$auc

vetor_modelo_train_decision_tree <- c("Random Forest - Desempenho amostra de treino",
                                      round(acuracia_random_forest_train,3),
                                      round(lower_acuracia_random_forest_train,3),
                                      round(upper_acuracia_random_forest_train,3),
                                      round(kappa_acuracia_random_forest_train,3),
                                      round(auc_random_forest_train,3),
                                      round(pvalor_acuracia_random_forest_train,10^20))

acuracia_random_forest_test <- resultado_random_forest_test$overall['Accuracy']

lower_acuracia_random_forest_test <-
resultado_random_forest_test$overall['AccuracyLower']
```

```
upper_acuracia_random_forest_test <-
resultado_random_forest_test$overall['AccuracyUpper']

kappa_acuracia_random_forest_test <- resultado_random_forest_test$overall['Kappa']

pvalor_acuracia_random_forest_test <-
resultado_random_forest_test$overall['AccuracyPValue']

auc_random_forest_test <- curva_roc_random_forest_test$auc

vetor_modelo_test_decision_tree <- c("Random Forest - Desempenho amostra de teste",
                                     round(acuracia_random_forest_test,3),
                                     round(lower_acuracia_random_forest_test,3),
                                     round(upper_acuracia_random_forest_test,3),
                                     round(kappa_acuracia_random_forest_test,3),
                                     round(auc_random_forest_test,3),
                                     round(pvalor_acuracia_random_forest_test,10^20))
compara_modelos <- rbind(vetor_modelo_train_decision_tree,
                         vetor_modelo_test_decision_tree)
rownames(compara_modelos) <- c("Random Forest - Desempenho amostra de treino",
                               "Random Forest - Desempenho amostra de teste")
colnames(compara_modelos) <- c("Modelo",
                               "Acuracia",
                               "Intervalo inferior de confiança - Acuracia",
                               "Intervalo superior de confiança - Acuracia",
```

```
                    "kappa",

                    "indice-auc",

                    "p-Value")

compara_modelos <- as.data.frame(compara_modelos)

View(compara_modelos)
```

Apêndice E – Script para Support Vector Machine

```
library(e1071)

library(multiROC)

library(pROC)

library(UBL)

dados_1 <- read.csv2("banco_total.csv",header=TRUE,dec = ".")

dim(dados_1)

head(dados_1)

dados = dados_1[,2:8]

dados$resistencia <- as.factor(dados$resistencia)

dados$alteracao <- as.factor(dados$alteracao)

dados$espacamento <- as.factor(dados$espacamento)

dados$persistencia <- as.factor(dados$persistencia)

dados$abertura <- as.factor(dados$abertura)

dados$agua <- as.factor(dados$agua)

dados_balanceados <- SmoteClassif(classificacao ~.,

                                  dados,

                                  C.perc = "balance",

                                  k = 5,

                                  repl = FALSE,

                                  dist = "Overlap")
```

```
train_idx <- sample(nrow(dados_balanceados), 2/3 * nrow(dados_balanceados))

dados_train <- dados_balanceados[train_idx, ]

dados_test <- dados_balanceados[-train_idx, ]

modelo_svm_final <- svm(

  classificacao ~ .,

  data = dados_train,

  kernel='radial',

  cost = 2, gamma = 1)

previsoes_modelo_svm_final <- predict(modelo_svm_final, newdata = dados_train)

validacao_previsoes_modelo_svm_final_train <-
confusionMatrix(previsoes_modelo_svm_final, dados_train$classificacao)

curva_roc_svm_train <- multiclass.roc(response = dados_train$classificacao, predictor =
as.numeric(as.factor(previsoes_modelo_svm_final)))

previsoes_modelo_svm_final <- predict(modelo_svm_final, newdata = dados_test)

validacao_previsoes_modelo_svm_final_test <-
confusionMatrix(previsoes_modelo_svm_final, dados_test$classificacao)

curva_roc_svm_test <- multiclass.roc(response = dados_test$classificacao, predictor =
as.numeric(as.factor(previsoes_modelo_svm_final)))

View(validacao_previsoes_modelo_svm_final_test$byClass)

acuracia_svm_train <- validacao_previsoes_modelo_svm_final_train$overall['Accuracy']

lower_acuracia_svm_train <-
validacao_previsoes_modelo_svm_final_train$overall['AccuracyLower']
```

```
upper_acuracia_svm_train <-
validacao_previsoes_modelo_svm_final_train$overall['AccuracyUpper']

kappa_acuracia_svm_train <- validacao_previsoes_modelo_svm_final_train$overall['Kappa']

pvalor_acuracia_svm_train <-
validacao_previsoes_modelo_svm_final_train$overall['AccuracyPValue']

auc_svm_train <- curva_roc_svm_train$auc

vetor_modelo_train_svm <- c("SVM - Desempenho amostra de treino",

                            round(acuracia_svm_train,3),

                            round(lower_acuracia_svm_train,3),

                            round(upper_acuracia_svm_train,3),

                            round(kappa_acuracia_svm_train,3),

                            round(auc_svm_train,3),

                            round(pvalor_acuracia_svm_train,10^20))

acuracia_svm_test <- validacao_previsoes_modelo_svm_final_test$overall['Accuracy']

lower_acuracia_svm_test <-
validacao_previsoes_modelo_svm_final_test$overall['AccuracyLower']

upper_acuracia_svm_test <-
validacao_previsoes_modelo_svm_final_test$overall['AccuracyUpper']

kappa_acuracia_svm_test <- validacao_previsoes_modelo_svm_final_test$overall['Kappa']

pvalor_acuracia_svm_test <-
validacao_previsoes_modelo_svm_final_test$overall['AccuracyPValue']

auc_svm_test <- curva_roc_svm_test$auc
```

```
vetor_modelo_test_svm <- c("SVM - Desempenho amostra de teste",
                           round(acuracia_svm_test,3),
                           round(lower_acuracia_svm_test,3),
                           round(upper_acuracia_svm_test,3),
                           round(kappa_acuracia_svm_test,3),
                           round(auc_svm_test,3),
                           round(pvalor_acuracia_svm_test,10^20))


compara_modelos <- rbind(vetor_modelo_train_svm,
                         vetor_modelo_test_svm)
rownames(compara_modelos) <- c("SVM - Amostra de treino",
                               "SVM - Amostra de teste")
colnames(compara_modelos) <- c("Modelo",
                               "Acuracia",
                               "Intervalo inferior de confiança - Acuracia",
                               "Intervalo superior de confiança - Acuracia",
                               "kappa",
                               "indice-auc",
                               "p-Value")
compara_modelos <- as.data.frame(compara_modelos)
View(compara_modelos)
```

Apêndice F – Script para Redes Neurais Artificiais

```
library(neuralnet)

library(gmodels)

library(ggsn)

library(caret)

library(plyr)

library(multiROC)

library(pROC)

library(UBL)

dados_1 <- read.csv2("dados_dummies_total.csv",header=TRUE,dec = ".")

dim(dados_1)

dados = dados_1[,2:26]

dados$O1resistencia <- as.factor(dados$O1resistencia)

dados$O2resistencia <- as.factor(dados$O2resistencia)

dados$O3resistencia <- as.factor(dados$O3resistencia)

dados$O4resistencia <- as.factor(dados$O4resistencia)

dados$O5resistencia <- as.factor(dados$O5resistencia)

dados$O6resistencia <- as.factor(dados$O6resistencia)

dados$O1alteracao <- as.factor(dados$O1alteracao)

dados$O2alteracao <- as.factor(dados$O2alteracao)

dados$O3alteracao <- as.factor(dados$O3alteracao)
```

```
dados$O4alteracao <- as.factor(dados$O4alteracao)

dados$O5alteracao <- as.factor(dados$O5alteracao)

dados$O1espacamento <- as.factor(dados$O1espacamento)

dados$O2espacamento <- as.factor(dados$O2espacamento)

dados$O3espacamento <- as.factor(dados$O3espacamento)

dados$O4espacamento <- as.factor(dados$O4espacamento)

dados$O1persistencia <- as.factor(dados$O1persistencia)

dados$O2persistencia <- as.factor(dados$O2persistencia)

dados$O3persistencia <- as.factor(dados$O3persistencia)

dados$O4persistencia <- as.factor(dados$O4persistencia)

dados$O1abertura <- as.factor(dados$O1abertura)

dados$O2abertura <- as.factor(dados$O2abertura)

dados$O3abertura <- as.factor(dados$O3abertura)

dados$O4abertura <- as.factor(dados$O4abertura)

dados$N1agua <- as.factor(dados$N1agua)

dados$classificacao <- as.factor(dados$classificacao)

dados_balanceados <- SmoteClassif(classificacao ~.,

                                  dados,

                                  C.perc = "balance",

                                  k = 5,

                                  repl = FALSE,
```

```
                        dist = "Overlap")

##summary(dados$classificacao)

##summary(dados_balanceados$classificacao)

##plot(dados$classificacao, ylim=c(0,2000))

##plot(dados_balanceados$classificacao, ylim=c(0,1000))

maxit<-as.integer(1000000)

# separação das amostras de treino e teste ##

train_idx <- sample(nrow(dados_balanceados), 2/3 * nrow(dados_balanceados))

dados_train <- dados_balanceados[train_idx, ]

dados_test <- dados_balanceados[-train_idx, ]

dados_train$O1resistencia <- as.numeric(dados_train$O1resistencia)

dados_train$O2resistencia <- as.numeric(dados_train$O2resistencia)

dados_train$O3resistencia <- as.numeric(dados_train$O3resistencia)

dados_train$O4resistencia <- as.numeric(dados_train$O4resistencia)

dados_train$O5resistencia <- as.numeric(dados_train$O5resistencia)

dados_train$O6resistencia <- as.numeric(dados_train$O6resistencia)

dados_train$O1alteracao <- as.numeric(dados_train$O1alteracao)

dados_train$O2alteracao <- as.numeric(dados_train$O2alteracao)

dados_train$O3alteracao <- as.numeric(dados_train$O3alteracao)

dados_train$O4alteracao <- as.numeric(dados_train$O4alteracao)

dados_train$O5alteracao <- as.numeric(dados_train$O5alteracao)
```

```
dados_train$O1espacamento <- as.numeric(dados_train$O1espacamento)

dados_train$O2espacamento <- as.numeric(dados_train$O2espacamento)

dados_train$O3espacamento <- as.numeric(dados_train$O3espacamento)

dados_train$O4espacamento <- as.numeric(dados_train$O4espacamento)

dados_train$O1persistencia <- as.numeric(dados_train$O1persistencia)

dados_train$O2persistencia <- as.numeric(dados_train$O2persistencia)

dados_train$O3persistencia <- as.numeric(dados_train$O3persistencia)

dados_train$O4persistencia <- as.numeric(dados_train$O4persistencia)

dados_train$O1abertura <- as.numeric(dados_train$O1abertura)

dados_train$O2abertura <- as.numeric(dados_train$O2abertura)

dados_train$O3abertura <- as.numeric(dados_train$O3abertura)

dados_train$O4abertura <- as.numeric(dados_train$O4abertura)

dados_train$N1agua <- as.numeric(dados_train$N1agua)

dados_test$O1resistencia <- as.numeric(dados_test$O1resistencia)

dados_test$O2resistencia <- as.numeric(dados_test$O2resistencia)

dados_test$O3resistencia <- as.numeric(dados_test$O3resistencia)

dados_test$O4resistencia <- as.numeric(dados_test$O4resistencia)

dados_test$O5resistencia <- as.numeric(dados_test$O5resistencia)

dados_test$O6resistencia <- as.numeric(dados_test$O6resistencia)

dados_test$O1alteracao <- as.numeric(dados_test$O1alteracao)

dados_test$O2alteracao <- as.numeric(dados_test$O2alteracao)
```

```
dados_test$O3alteracao <- as.numeric(dados_test$O3alteracao)

dados_test$O4alteracao <- as.numeric(dados_test$O4alteracao)

dados_test$O5alteracao <- as.numeric(dados_test$O5alteracao)

dados_test$O1espacamento <- as.numeric(dados_test$O1espacamento)

dados_test$O2espacamento <- as.numeric(dados_test$O2espacamento)

dados_test$O3espacamento <- as.numeric(dados_test$O3espacamento)

dados_test$O4espacamento <- as.numeric(dados_test$O4espacamento)

dados_test$O1persistencia <- as.numeric(dados_test$O1persistencia)

dados_test$O2persistencia <- as.numeric(dados_test$O2persistencia)

dados_test$O3persistencia <- as.numeric(dados_test$O3persistencia)

dados_test$O4persistencia <- as.numeric(dados_test$O4persistencia)

dados_test$O1abertura <- as.numeric(dados_test$O1abertura)

dados_test$O2abertura <- as.numeric(dados_test$O2abertura)

dados_test$O3abertura <- as.numeric(dados_test$O3abertura)

dados_test$O4abertura <- as.numeric(dados_test$O4abertura)

dados_test$N1agua <- as.numeric(dados_test$N1agua)

nn <- neuralnet((classificacao == "classe_1")

                + (classificacao == "classe_2")

                + (classificacao == "classe_3")

                + (classificacao == "classe_4")

                + (classificacao == "classe_5")
```

```
~ O1resistencia + O2resistencia + O3resistencia + O4resistencia + O5resistencia +
O6resistencia +

O1alteracao + O2alteracao + O3alteracao + O4alteracao + O5alteracao

+ O1espacamento + O2espacamento + O3espacamento + O4espacamento +

O1persistencia + O2persistencia + O3persistencia + O4persistencia +

O1abertura + O2abertura + O3abertura + O4abertura + N1agua, data = dados_train,
algorithm = "rprop+", err.fct = "sse",

stepmax=maxit, threshold =1, hidden = c(25), act.fct = "tanh", linear.output =
FALSE)

##plot(nn, rep = "best",

##     radius = 0.05, arrow.length = 0.2, intercept = TRUE,

##    intercept.factor = 0.4, information = FALSE, information.pos = 0.1,

##    col.entry.synapse = "blue4", col.entry = "black",

##    col.hidden = "black", col.hidden.synapse = "black",

##    col.out = "black", col.out.synapse = "brown2",

##   col.intercept = "blue", fontsize = 14, dimension = 3,

##   show.weights = FALSE)

pred_train_nn <- predict(nn, dados_train)

d_train_nn <- apply(pred_train_nn, 1, which.max)

d_train_nn <- mapvalues(d_train_nn,from = c(1,2,3,4,5), to = c("classe_1", "classe_2",
"classe_3", "classe_4", "classe_5"))

d_train_nn <- as.factor(d_train_nn)
```

```
resultado_train_nn <- confusionMatrix(d_train_nn, dados_train$classificacao)

curva_roc_train_nn <- multiclass.roc(response = dados_train$classificacao, predictor = as.numeric(as.factor(d_train_nn)))

pred_test_nn <- predict(nn, dados_test)

d_test_nn <- apply(pred_test_nn, 1, which.max)

d_test_nn <- mapvalues(d_test_nn,from = c(1,2,3,4,5), to = c("classe_1", "classe_2", "classe_3", "classe_4", "classe_5"))

d_test_nn <- as.factor(d_test_nn)

resultado_test_nn <- confusionMatrix(d_test_nn, dados_test$classificacao)

curva_roc_test_nn <- multiclass.roc(response = dados_test$classificacao, predictor = as.numeric(as.factor(d_test_nn)))

View(resultado_test_nn$byClass)

acuracia_nn_train <- resultado_train_nn$overall['Accuracy']

lower_acuracia_nn_train <- resultado_train_nn$overall['AccuracyLower']

upper_acuracia_nn_train <- resultado_train_nn$overall['AccuracyUpper']

kappa_acuracia_nn_train <- resultado_train_nn$overall['Kappa']

pvalor_acuracia_nn_train <- resultado_train_nn$overall['AccuracyPValue']

auc_nn_train <- curva_roc_train_nn$auc

vetor_modelo_train_nn <- c("Redes Neurais Artificiais - Desempenho amostra de treino",
                           round(acuracia_nn_train,3),
                           round(lower_acuracia_nn_train,3),
                           round(upper_acuracia_nn_train,3),
```

```
                    round(kappa_acuracia_nn_train,3),
                    round(auc_nn_train,3),
                    round(pvalor_acuracia_nn_train,10^20))
acuracia_nn_test <- resultado_test_nn$overall['Accuracy']
lower_acuracia_nn_test <- resultado_test_nn$overall['AccuracyLower']
upper_acuracia_nn_test <- resultado_test_nn$overall['AccuracyUpper']
kappa_acuracia_nn_test <- resultado_test_nn$overall['Kappa']
pvalor_acuracia_nn_test <- resultado_test_nn$overall['AccuracyPValue']
auc_nn_test <- curva_roc_test_nn$auc
vetor_modelo_test_nn <- c("Redes Neurais Artificiais - Desempenho amostra de teste",
                    round(acuracia_nn_test,3),
                    round(lower_acuracia_nn_test,3),
                    round(upper_acuracia_nn_test,3),
                    round(kappa_acuracia_nn_test,3),
                    round(auc_nn_test,3),
                    round(pvalor_acuracia_nn_test,10^20))
compara_modelos <- rbind(vetor_modelo_train_nn,
                   vetor_modelo_test_nn)
rownames(compara_modelos) <- c("Redes Neurais Artificiais - Desempenho amostra de
treino",
                        "Redes Neurais Artificiais - Desempenho amostra de teste")
```

```
colnames(compara_modelos) <- c("Modelo",
                               "Acuracia",
                               "Intervalo inferior de confiança - Acuracia",
                               "Intervalo superior de confiança - Acuracia",
                               "kappa",
                               "indice-auc",
                               "p-Value")
compara_modelos <- as.data.frame(compara_modelos)
View(compara_modelos)
```

Apêndice G – Script para Partitioning Around Medoids

```
dados <- read.csv2("pasta1.csv",header=TRUE,dec = ".")

head(dados)

dados <- dados[,2:7]

## PAM

library(cluster)

cl <- pam(dados, 7)

summary(cl)

x11()

plot(cl)

grupos <- cl$cluster

dados_pam <- cbind(dados,grupos)

head(dados_pam)

write.csv(dados_pam, file = "dados_pam")

classification_tree <- rpart(grupos ~ .,

                             data = dados_pam,

                             method = "class",

                             parms = list(split = "gini"),

                             control = rpart.control(cp = 0.01))

x11()

prp(classification_tree, type = 0, extra = 1, under = TRUE, compress = TRUE)
```

```
pred_tree <- predict(classification_tree, dados[,-7])

c <- apply(pred_tree, 1, which.max)

c <- mapvalues(c,from = c(1,2,3,4,5,6,7), to = c("Classe A",
                                                 "Classe B",
                                                 "Classe C",
                                                 "Classe D",
                                                 "Classe E",
                                                 "Classe F",
                                                 "Classe G"))

table(c,dados$grupos)

resultado_decision_tree_test <- confusionMatrix(c, dados$grupos)

table(pred_tree,dados$grupos)
```

Apêndice H – Script para Análise Fatorial

```
library(MVN)

library(goft)

library(psych)

library(rela)

library(Rcmdr)

library(MVar.pt)

library(mvShapiroTest)

library(royston)

library(ggplot2)

library(ggcorrplot)

library(psych)

data <- read.csv2("dataset_AF.csv",header=TRUE,dec = ",")

head(data)

A = data[2:7]

X = as.matrix(A)

## Bartlett sphericity ##

Bartlett.sphericity.test <- function(x)

{

  method <- "Bartlett's test of sphericity"

  data.name <- deparse(substitute(x))
```

```
  x <- subset(x, complete.cases(x)) # Omit missing values
  n <- nrow(x)
  p <- ncol(x)
  chisq <- (1-n+(2*p+5)/6)*log(det(cor(x)))
  df <- p*(p-1)/2
  p.value <- pchisq(chisq, df, lower.tail=FALSE)
  names(chisq) <- "X-squared"
  names(df) <- "df"
  return(structure(list(statistic=chisq, parameter=df, p.value=p.value,
                        method=method, data.name=data.name), class="htest"))
}
Bartlett.sphericity.test(A)
## KMO Test ##
R = cor(X)
KMO(R)
## Kaiser criterion ##
k = sum(eigen(R)$values>=1)
k
#AF#
af = FA(A, method = 'PC', nfactor = 3)
## verification of the communality and specificity of each variable ##
```

```
h2 = af$mtxcomuna

h2

psi = af$mtxvaresp

psi

## evaluation of the matrix of factor loadings for the interpretation of the factors.

L = af$mtxcarga

L

## Matrix of factor loadings after rotation in model

rot1.1 = varimax(L)

rot1.1
```