

UFRRJ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

DISSERTAÇÃO

**APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS
PARA PARAMETRIZAÇÃO DA
CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA EM SOLOS
NÃO SATURADOS**

Renato de Queiroz Machado

2023



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM
MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL**

**APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA
PARAMETRIZAÇÃO DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA EM SOLOS
NÃO SATURADOS**

RENATO DE QUEIROZ MACHADO

Sob orientação de
Wilian Jeronimo dos Santos

Dissertação submetida como requisito
parcial para obtenção do grau de **Mes-
tre** no Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computaci-
onal, Área de Concentração em Mode-
lagem Matemática e Computacional.

Seropédica, RJ, Brasil
Dezembro de 2023

Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Biblioteca Central / Seção de Processamento Técnico

Ficha catalográfica elaborada
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

DMacha DE QUEIROZ MACHADO, RENATO, 09/11/1981-
APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA
PARAMETRIZAÇÃO DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA EM SOLOS
NÃO SATURADOS / RENATO DE QUEIROZ MACHADO. -
Seropédica, 2023.
58 f.: il.

Orientador: WILIAN JERONIMO DOS SANTOS.
Dissertação(Mestrado). -- Universidade Federal Rural
do Rio de Janeiro, PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL, 2023.

1. Condutividade Hidráulica. 2. Redes Neurais
Artificiais. 3. Perceptron de multicamadas (MLP). I.
JERONIMO DOS SANTOS, WILIAN, 08/11/1984-, orient. II
Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro.
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E
COMPUTACIONAL III. Título.



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL



Seropédica-RJ, 13 de dezembro de 2023.

Renato de Queiroz Machado

Dissertação submetida como requisito parcial para a obtenção de grau de **Mestre**, no Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional PPGMMC, área de Concentração em Modelagem Matemática e Computacional.

DISSERTAÇÃO APROVADA EM 13/12/2023

Wilian Jerônimo dos Santos Drº UFRRJ (Orientador, Presidente da Banca)

Felipe Leite Coelho da Silva Drº UFRRJ (membro interno)

Marcos Bacis Ceddia Drº UFRRJ (Externo ao Programa)

Igor Campos de Almeida Lima Drº UERJ (Externo à Instituição)

ATA Nº ata/2023 - ICE (12.28.01.23)
(Nº do Documento: 6704)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 27/12/2023 10:32)
FELIPE LEITE COELHO DA SILVA
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
DeptM (12.28.01.00.00.63)
Matrícula: ###398#2

(Assinado digitalmente em 18/01/2024 08:57)
MARCOS BACIS CEDDIA
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
DATS (11.39.00.35)
Matrícula: ###202#6

(Assinado digitalmente em 04/01/2024 14:13)
WILIAN JERONIMO DOS SANTOS
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
DeptM (12.28.01.00.00.63)
Matrícula: ###287#1

(Assinado digitalmente em 16/01/2024 15:34)
IGOR CAMPOS DE ALMEIDA LIMA
ASSINANTE EXTERNO
CPF: ####.###.587-##

Visualize o documento original em <https://sipac.ufrrj.br/documentos/> informando seu número: 6704, ano: 2023, tipo: ATA, data de emissão: 27/12/2023 e o código de verificação: 4fade85c7d

*"Tudo aquilo que sou, ou pretendo ser, devo
a um anjo, minha mãe. ..."*

Agradecimentos

Agradeço reverentemente a Deus pela dádiva da vida, pela manutenção da saúde e pela capacidade incessante de aprender e aprimorar-me academicamente. Expresso minha profunda gratidão à minha mãe, Miriam de Queiroz Machado, pela orientação, pelos inestimáveis ensinamentos e por todos os sacrifícios dedicados ao meu desenvolvimento.

Dirijo também meus sinceros agradecimentos à minha esposa, Ana Carolina, por seu auxílio e pelo suporte que proporcionou, viabilizando a concretização deste mestrado. Reconheço e agradeço aos respeitáveis professores do curso, cujas aulas e sábios ensinamentos desempenharam papel fundamental na elaboração deste trabalho.

À dedicada colaboração do amigo Victor Hugo Soares Wican, expresso minha gratidão pelas extensas horas de estudo, resolução de exercícios e assistência constante. Ao amigo Bryan Aoliabe Siqueira, reconheço seus valiosos diálogos e auxílio inestimável.

Agradeço ao professor Igor Campos de Almeida Lima por todos os momentos de auxílio, dos infináveis e importantes diálogos e orientações enriquecedoras.

Não posso deixar de expressar minha sincera gratidão ao Professor Wilian Jerônimo dos Santos pela orientação e ao Professor Carlos Andrés Reyna Vera Tudela por sua constante ajuda, orientação, apoio e direção ao longo deste percurso acadêmico.

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

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001.

*"A matemática é o alfabeto no qual
Deus escreveu o universo."
Galileu Galilei*

RESUMO GERAL

MACHADO, Renato de Queiroz. **APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS DO TIPO PERCEPTRON DE MÚLTIPAS CAMADAS PARA PARAMETRIZAÇÃO DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA EM SOLOS NÃO SATURADOS**. 2023. 58f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática e Computacional). Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2023.

O conhecimento da condutividade hidráulica é fundamental para a análise do fluxo da água em solos saturados e não saturados, podendo ser obtida através de medidas experimentais. Entretanto, experimentos de campo podem acarretar em um alto custo financeiro, além da complexidade e tempo necessários. Além disso, problemas de amostragem como erros na coleta, deformação e a presença de trincas ou fissuras são capazes de diminuir a representatividade do material coletado. Uma alternativa geralmente utilizada para estimar a condutividade hidráulica é através do uso de modelos matemáticos. Esses métodos se baseiam em ajustes dos parâmetros das curvas de retenção da água no solo, resolvendo um problema de mínimos quadrados não linear, a partir de medidas realizadas em laboratório para a obtenção dos valores de umidade e potencial matricial em amostras de solos coletadas. As curvas para a condutividade hidráulica são obtidas de forma teórica a partir dos diferentes modelos para as curvas de retenção, cujos parâmetros são obtidos a partir do ajuste realizado no modelo de curva de retenção. A existência de diferentes modelos se deve justamente por não existir um modelo universal, que possa ser aplicado em qualquer tipo de solo. Como alternativa, no presente trabalho, propõe-se o uso das redes neurais artificiais (RNAs), uma ferramenta computacional que tem sido usada em diferentes áreas da ciência. Devido ao modo de funcionamento, as RNAs não dependem de um modelo matemático que relate os dados de entrada com os dados de saída, sendo aplicadas em situações não lineares, complexas, que possuam alto nível de incertezas, se destacando pela capacidade intrínseca de aprendizagem. Esta pesquisa tem por objetivo aplicar a Rede Neural Artificial (RNA) do tipo *Perceptron* de Multicamadas(MLP) na criação de um modelo para determinar a condutividade hidráulica em solos não saturados. Os resultados se mostraram promissores, especialmente utilizando o modelo MLP com sete variáveis e sem a fração de argila (uma com 6 e a outra com 1 neurônios).

Palavras-chave: Condutividade Hidráulica, Redes Neurais Artificiais, Perceptron de multicamadas (MLP).

GENERAL ABSTRACT

MACHADO, Renato de Queiroz. **APPLICATION OF MULTI-LAYER PERCEPTRON ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS FOR PARAMETERIZATION OF HYDRAULIC CONDUCTIVITY IN UNSATURATED SOILS** . 2023. 58p. Dissertation (Master in Mathematical and Computational Modeling). Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2023.

The knowledge of hydraulic conductivity is fundamental for the analysis of water flow in unsaturated soils and can be obtained through experimental measurements. However, field experiments can lead to high financial costs, as well as complexity and time requirements. Additionally, sampling issues such as errors in collection, deformation, and the presence of cracks or fissures can reduce the representativeness of the collected material. An alternative commonly used to estimate hydraulic conductivity is through the use of mathematical models. These methods are based on fitting the parameters of the soil water retention curves, solving a nonlinear least squares problem, based on measurements performed in the laboratory to obtain moisture and matric potential values in soil samples. The curves for hydraulic conductivity are theoretically derived from different models for retention curves, whose parameters are obtained from the fit performed in the retention curve model. The existence of different models is precisely due to the lack of a universal model that can be applied to any type of soil. As an alternative, this study proposes the use of artificial neural networks (ANNs), a computational tool that has been used in different areas of science. Due to their mode of operation, ANNs do not depend on a mathematical model that relates input data to output data and can be applied in nonlinear, complex situations with a high level of uncertainties, standing out for their intrinsic learning ability. This research aims to apply the Multilayer Perceptron (MLP) Artificial Neural Network in the creation of a model to determine hydraulic conductivity in unsaturated soils. The results were promising, especially when using the MLP model with seven variables and without the clay fraction (one with 6 neurons and another with 1 neuron).

Keywords: Hydraulic Conductivity, Artificial Neural Networks, Multilayer Perceptron (MLP).
Listas (comentar se não houver) e sumário

Sumário

1 INTRODUÇÃO	13
1.1 Considerações Preliminares	13
1.2 Objetivos.....	13
1.2.1 Objetivo geral	13
1.2.2 Objetivos específicos	13
1.3 Metodologia	14
1.4 Escopo do trabalho	15
2 SOLOS NÃO SATURADOS	16
2.1 A caracterização da composição física de um solo	16
2.2 Energia potencial da água no solo	17
2.3 Equações de ajuste para a curva de retenção	19
2.3.0.1 Gardner(1958)	20
2.3.0.2 Brooks & Corey (1964)	20
2.3.1 Van-Genuchten (1980)	20
2.3.2 Fredlund & Xing (1994).....	21
2.4 Condutividade hidráulica	21
2.4.1 Métodos de estimativa da condutividade hidráulica em solos não saturados	22
2.4.1.1 Gardner (1958)	22
2.4.2 Brooks & Corey (1964)	22
2.4.2.1 Van-Genuchten (1980)	23
2.4.3 Fredlund, Xing e Huang (1994).....	23
3 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNAs).....	25
3.1 Neurônios artificiais	25
3.1.1 Ativação Sigmoide	27
3.1.2 Ativação Tangente Hiperbólica (TanH)	27
3.1.3 Ativação linear retificada (ReLU).....	28
3.1.4 Ativação Ativação Leaky ReLU	29
3.1.5 Unidade linear exponencial (ELU).....	30
3.2 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNA)	31
3.2.1 Perceptron	31

3.2.2 PERCEPTRON DE MÚLTIPLAS CAMADAS (MLP)	32
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES	36
4.1 Modelos com todas as variáveis	37
4.1.1 MLP(5,4)	37
4.1.2 MLP(6,4)	38
4.1.3 MLP(7,4)	38
4.2 Modelos com menos de oito variáveis	39
4.2.1 MLP5(6,4)	40
4.2.2 MLP7(5,11) - Sem silte	40
4.2.3 MLP7(6,1) - Sem Argila.....	41
4.3 MLP com os menores erros	41
5 CONCLUSÃO	43
5.1 Conclusão	43
5.2 Trabalhos futuros.....	43
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	44
7 ANEXO I - O BANCO DE DADOS	45
8 ANEXO II - O CÓDIGO DO R.....	52

Lista de Figuras

Figura 2.1 – Exemplo de uma possível composição do solo, em volume. Adaptado de [BRADY; WEIL, 2013].....	16
Figura 2.2 – Relação entre a energia potencial da água livre em um estado de referência padrão (pressão, temperatura e altura) e a da água do solo. Adaptada de [BRADY; WEIL, 2013].....	18
Figura 2.3 – Relação entre a energia potencial da água livre em um estado de referência padrão. Fonte [BRADY; WEIL, 2013]	19
Figura 3.1 – Exemplo de um neurônio. Adaptado de [GONÇALVES, 2017]	25
Figura 3.2 – Exemplo de um modelo RNA. Adaptada de [FURTADO, 2019]	26
Figura 3.3 – Exemplo de uma função sigmoide	27
Figura 3.4 – Exemplo de uma função TanH	28
Figura 3.5 – Exemplo de uma função ReLU	29
Figura 3.6 – Exemplo de uma função Leaky ReLU	30
Figura 3.7 – Exemplo de uma função ELU.....	30
Figura 3.8 – Exemplo de uma RNA de múltiplas camadas. Adaptado de [ALVES, 2017].	31
Figura 3.9 – Exemplo de uma MLP. Adaptada de [GONÇALVES, 2017]	33
Figura 3.10 – Fluxo de processamento do algoritmo <i>back-propagation</i> . Adaptado de [GONÇALVES, 2017].....	34
Figura 4.1 – Boxplot das variáveis	36
Figura 4.2 – MLP com 5 e 4 neurônios nas camadas ocultas	37
Figura 4.3 – MLP com 6 e 4 neurônios nas camadas ocultas	38
Figura 4.4 – MLP com 7 e 4 neurônios nas camadas ocultas	39
Figura 4.5 – MLP com 6 e 4 neurônios nas camadas ocultas	40
Figura 4.6 – MLP com 6 e 1 neurônios nas camadas ocultas	41
Figura 4.7 – Valores reais x valores estimados - modelo com 7 variáveis sem fração de argila	42

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 – Métricas de Previsão.	37
Tabela 4.2 – Métricas de Previsão.	38
Tabela 4.3 – Métricas de Previsão.	39
Tabela 4.4 – Comparação dos erros	39
Tabela 4.5 – Métricas de Previsão.	40
Tabela 4.6 – Métricas de Previsão.	40
Tabela 4.7 – Métricas de Previsão.	41
Tabela 4.8 – Comparação dos erros	41

Lista de Abreviações e Siglas

MLP	Redes de Perceptron de multicamadas
SWRC	Curva de retenção solo-água
AEV	Valor de entrada de ar
RNA	Redes neurais artificiais
TanH	Ativação Tangente Hiperbólica
ReLU	Ativação linear retificada
ELU	Unidade linear exponencial
MLP	<i>Perceptron</i> de múltiplas camadas
MSE	Erro quadrático médio
MAE	Erro médio absoluto
MAPE	Erro médio absoluto percentual

Introdução

1.1 Considerações Preliminares

Vários modelos de métodos numéricos foram desenvolvidos para a estimativa da condutividade hidráulica, como os modelos de Gardner (1958), Brooks & Corey (1964), Van Genuchten (1980) e Fredlund & Xing (1994) [SILVA, 2020]. Entretanto, esses métodos demandam variáveis específicas que podem divergir das variáveis sob posse do pesquisador.

A inteligência artificial pode ser uma abordagem mais flexível e poderosa para parametrização de valores, pois pode lidar com qualquer variável que o pesquisador possua, mesmo sendo dados não lineares, heterogêneos e não estruturados que podem ser difíceis de serem modelados por métodos numéricos tradicionais. Além disso, a inteligência artificial pode aprender continuamente a partir de novos dados, atualizando os parâmetros de forma dinâmica para melhorar a precisão das previsões ou classificações.

Atualmente, as redes neurais artificiais (RNA) são uma forte ferramenta computacional e têm sido usadas em diferentes áreas da ciência. Devido ao modo de funcionamento, as RNAs não dependem de um modelo matemático que relate os dados de entrada com os dados de saída, sendo aplicadas em situações não lineares complexas que possuem alto nível de incertezas. As RNAs se destacam pela capacidade de aprendizagem, a habilidade de criação de limites de decisão altamente não lineares e a não parametrização [MACHADO, 2004].

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo geral

A pesquisa tem por objetivo geral aplicar uma RNA do tipo *Perceptron* de Multicamadas (MLP) no estabelecimento de um modelo para determinar a condutividade hidráulica de solos não saturados.

1.2.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- Analisar os processos para ocorrer a condutividade hidráulica em solos não saturados;
- Analisar os modelos para a determinação da curva de condutividade hidráulica;

- Verificar a melhor configuração da MLP que minimiza os erros obtidos por diferentes métricas.

1.3 Metodologia

Na análise foi utilizado uma *perceptron* de múltiplas camadas, uma entre os vários tipos de rede neural artificial existente. Com o auxílio do programa Rstudio 4.1.1, foram realizadas análises usando os pacotes *neuralnet* (Stefan Fritsch, 2019) e o *caret*(Max Kuhn, 2018). Os dados utilizados para a análise resultam de um compilado de livros e artigos presentes na literatura, como proposto em [SILVA, 2020] presente no anexo I. Inúmeras composições e combinações entre as quantidades de nós em cada camada também são propostas, buscando minimizar o erro dos modelos.

Os dados utilizados para uma análise prévia é um compilado de vários livros e artigos feito por [SILVA, 2020], sendo composto pelas variáveis:

- Índice de vazios inicial e_o adimensional;
- Teor de umidade gravimétrico inicial (w_0) ou Teor de umidade volumétrico variando com a sucção matricial (θ), em %;
- Fração de argila (C), em %;
- Fração de silte (M), em %;
- Fração de areia (S), em %;
- Índice de plasticidade (IP) em %;
- Coeficiente de permeabilidade hidráulica saturado (k_{sat}), em cm/s;
- Sucção matricial ($u_a - u_W$), em kPa.
- Coeficiente de permeabilidade hidráulica (k_w), em cm/s.

A variável k_w é a variável de saída, objetivo da previsão, mas também foi obtida de forma experimental. Ela será utilizada para calcular o erro do nosso modelo, comparando com os valores experimentais com os valores calculados.

O número inicial de neurônios na camada oculta foi estimado pelo método de Fletcher-Gloss:

$$2\sqrt{n} + n_2 \leq n_1 < 2n + 1 \quad (1.1)$$

Onde n é o numero de neurônios na camada de entrada, n_1 é o número de neurônios na camada oculta e n_2 são os neurônios na camada de saída.

Para fazer o treinamento, foram usadas 70% dos dados para treino e 30% para testar e calcular os erros. Os dados foram separados aleatoriamente e os valores destinado ao teste foram comparados com os valores preditos pelo modelo, gerando uma tabela de erros (MAE, MAPE e RMSE).

O desempenho dos modelos foram verificados através das métricas de precisão, erro quadrático médio (MSE), erro médio absoluto (MAE) e o erro médio absoluto percentual (MAPE).

- O erro quadrático médio (*MSE - Mean Squared Error*) é definido por:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2$$

(b) O erro médio absoluto (*MAE* - *Mean Absolute Error*) é definido por:

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i|$$

(c) O erro médio absoluto percentual (*MAPE* - *Mean Absolute Percentage Error*) é definido por:

$$MAPE = 100 \times \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right|$$

As três medidas descritas acima se baseiam apenas no ajuste do modelo, comparando os valores médios previstos com os observados.

1.4 Escopo do trabalho

A estrutura deste trabalho encontra-se dividida em 5 capítulos. O primeiro capítulo é onde está a introdução, objetivo, metodologia e o escopo do trabalho. No segundo capítulo, encontra-se a base teórica, no que se refere ao comportamento da água em solos não saturados e as equações de governo. No terceiro capítulo é apresentada a base teórica das redes neurais artificiais e seus conceitos. O quarto capítulo é destinado aos resultados e discussões e no capítulo 5 estão as conclusões e propostas para trabalhos futuros. Por fim, são apresentadas as referências bibliográficas e os apêndices citados ao longo do texto.

Solos não saturados

Um solo é um corpo tridimensional natural, cuja composição física é complexa e variável, resultante da interação e mistura não homogênea de seus componentes. O solo consiste em três frações físicas: sólidos (formados pelos componentes mineral e orgânico), líquidos (formados pelo componente água com sais minerais e substâncias orgânicas dissolvidas) e gases (formado pelo componente "ar do solo").

As proporções relativas desses quatro componentes (minerais, material orgânico, água e ar) influenciam no comportamento e a produtividade dos solos, podendo se apresentar de diversas formas [BRADY; WEIL, 2013]. Uma possível combinação é a Figura 2.1, uma representação onde o espaço poroso é de aproximadamente 50% do solo e a parte sólida corresponde a outra metade.

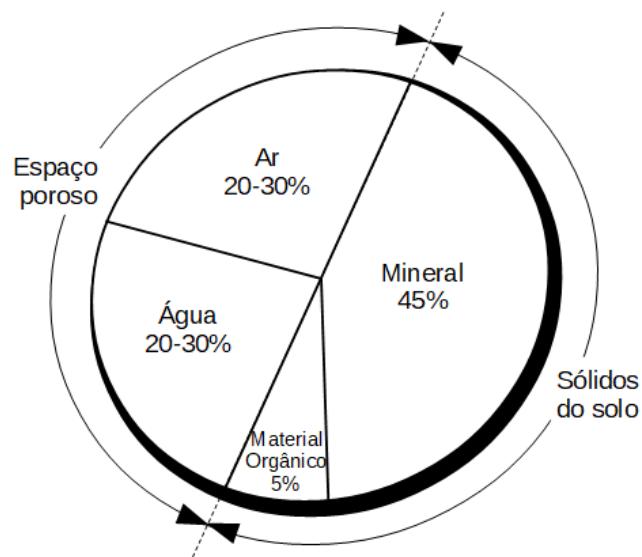


Figura 2.1 – Exemplo de uma possível composição do solo, em volume. Adaptado de [BRADY; WEIL, 2013]

2.1 A caracterização da composição física de um solo

Os sólidos formam a denominada matriz do solo e são compostos por dois tipos de matéria: a de origem mineral e de origem orgânica. A matéria de origem mineral é composta

por partículas minerais: as maiores partículas (pedras, cascalho e areias grossas) normalmente são originárias de fragmentos de rocha formados por vários minerais diferentes. Já as partículas menores, costumam ser constituídas de um único mineral. A matéria orgânica do solo consiste em uma grande variedade de substâncias orgânicas, incluindo os organismos vivos, restos de organismos que em algum momento ocuparam o solo e compostos orgânicos produzidos pelo metabolismo atual e passado ocorrido no solo.

O espaço entre os sólidos é chamado de espaço poroso ou poros. O tamanho, a forma e a maneira como os sólidos se arranjam no solo definem o tamanho e forma dos seus poros. Aproximadamente metade do volume do solo é composto por poros de tamanhos variados, que são preenchidos com água ou ar. Quando a água penetra no solo, ela desloca o ar de alguns dos poros, mas quando a água é retirada do solo, esses poros são novamente preenchidos pelo ar. Desta forma, o teor de ar de um solo é inversamente proporcional ao seu conteúdo de água. Um solo que apresenta seus poros totalmente preenchidos por água, que possui um grau de saturação de 100%, é chamado de solo saturado. Solo não saturado são solos que seus poros são preenchidos por água e ar.

A composição do gás (ar do solo) varia muito de um local para outro e é aproximadamente igual à da atmosfera, porém, contendo mais CO_2 e menos O_2 , além de apresentar uma umidade relativa sempre próxima a 100%. Em compartimentos pequenos e isolados, alguns gases são consumidos pelas raízes das plantas ou pelas reações microbianas, enquanto outros são liberados, modificando de forma significativa a composição do ar do solo [LIER, 2020].

A água é essencial para a função ecológica do solo, pois é essencial para a sobrevivência e crescimento das plantas e outros organismos do solo. O movimento da água e suas substâncias através dos perfis do solo é de grande importância para a qualidade e quantidade dos recursos hídricos regionais e locais. A água que se move através do solo também é uma importante força motriz da formação do solo [LIER, 2020].

A água é retida nos poros do solo com diferentes níveis de tenacidade, dependendo da quantidade e tamanho dos poros. A atração entre a água e as superfícies das partículas do solo restringe severamente o fluxo de água. Como resultado, nem toda a umidade do solo está disponível para as plantas.

A água do solo não está em um estado puro, pois contém inúmeras matérias inorgânicas, orgânicas e sais minerais dissolvidos, por isso dever ser chamada formalmente de solução do solo. Os sólidos, principalmente pequenas partículas orgânicas e inorgânicas, liberam íons na solução do solo, de onde são absorvidos pelas raízes das plantas [BRADY; WEIL, 2013].

2.2 Energia potencial da água no solo

A diferença nos níveis de energia da água em pontos afastados no perfil do solo é o que faz com que ela se movimente. Por isso, para estudar o movimento da água é necessário conhecer seu estado de energia.

Existem três forças importantes que afetam o nível de energia da água no solo. A primeira é adesão (a interação entre a água e as partículas sólidas levam ao surgimento das forças capilares e de adsorção) que fornece uma força matricial produzindo uma acentuada redução no estado de energia da água perto da superfície das partículas. A segunda é a atração de íons e outros solutos pela água, que resulta em forças osmóticas, as quais exercem a tendência para reduzir o estado energético de água na solução do solo. A terceira grande força em ação é a gravidade, que sempre tende a puxar o líquido para baixo. O nível de energia da água no solo em uma determinada altura no perfil é, geralmente, maior que o da água a uma altura mais baixa. Essa diferença no nível de energia fará com que o fluxo de água se direcione para baixo

[BRADY; WEIL, 2013].

A Figura 2.2 demonstra a relação entre os três tipos de potencial.

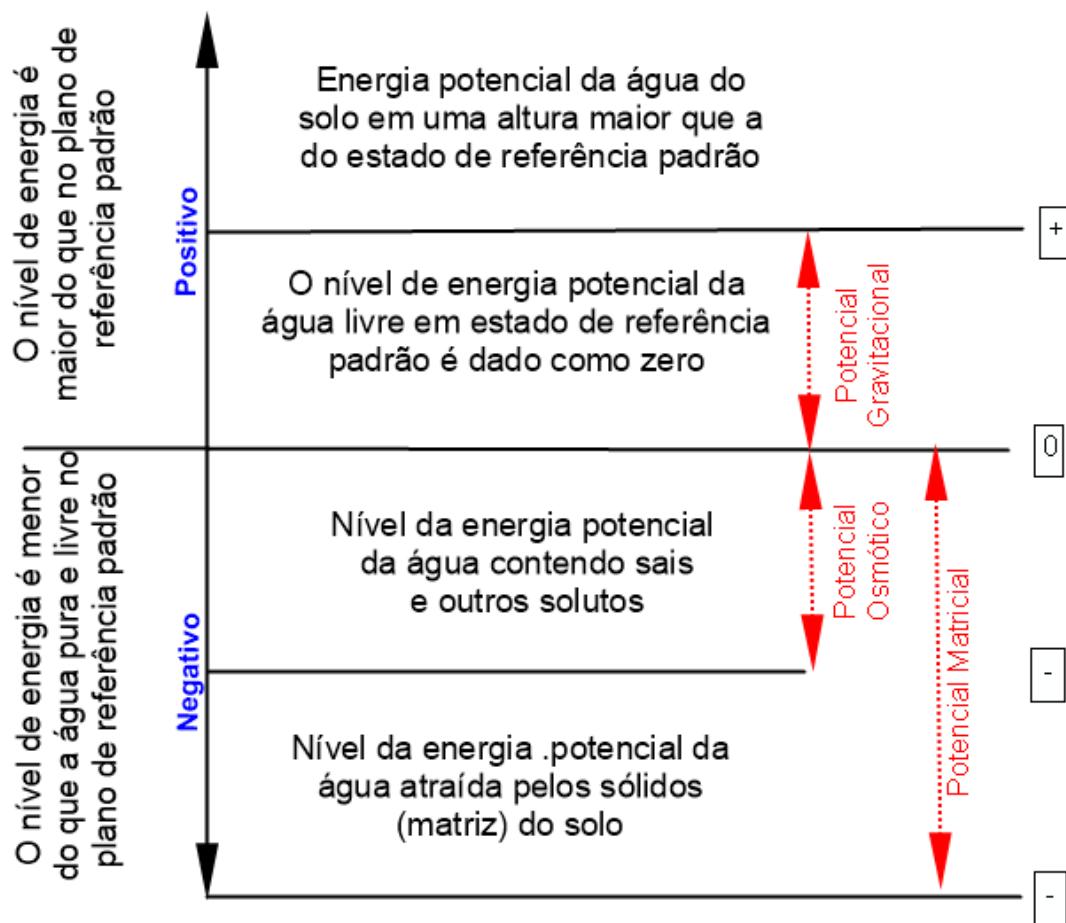


Figura 2.2 – Relação entre a energia potencial da água livre em um estado de referência padrão (pressão, temperatura e altura) e a da água do solo. Adaptada de [BRADY; WEIL, 2013]

Se a água do solo contém sais e outros solutos, a atração mútua entre as moléculas de água e estes compostos químicos reduz a energia potencial da água. O potencial osmótico é o nome dado ao grau de redução da energia potencial da água, que ocorre pela atração mútua entre as moléculas de água e estes compostos químicos. Da mesma forma, a atração mútua entre os sólidos do solo e as moléculas da água também reduzem a energia potencial da água. Neste caso, a redução é chamada de potencial matricial. Como ambas as interações reduzem o nível da energia potencial da água em relação a água livre, as mudanças no nível de energia (potencial osmótico e matricial) são todas consideradas negativas. Quando tenta remover água de um solo úmido, a raiz de uma planta precisa superar todas essas três forças simultaneamente [BRADY; WEIL, 2013].

Além dessas três forças, um sistema pode possuir energia cinética oriunda de sua velocidade instantânea, mas o movimento dos componentes do solo é muito lento, de forma que essa energia não é de grande importância à física do solo, pois o movimento dos componentes do solo, quando ocorre, é muito lento. A energia de um sistema em função de sua posição dentro de um campo de força é chamada energia potencial ou, simplesmente, potencial. As grandezas para expressar a extensão do sistema são a massa, o volume, o número de mol e, especialmente

prático para o caso do potencial da água, o peso [LIER, 2020]

A relação entre o potencial matricial e o teor de água no solo, chamada de curva de retenção da água no solo, é determinada experimentalmente utilizando-se a própria água como uma ferramenta auxiliar. A curva de retenção é a representação gráfica do teor de água (θ) em função do potencial matricial h , como mostra a figura 2.3.

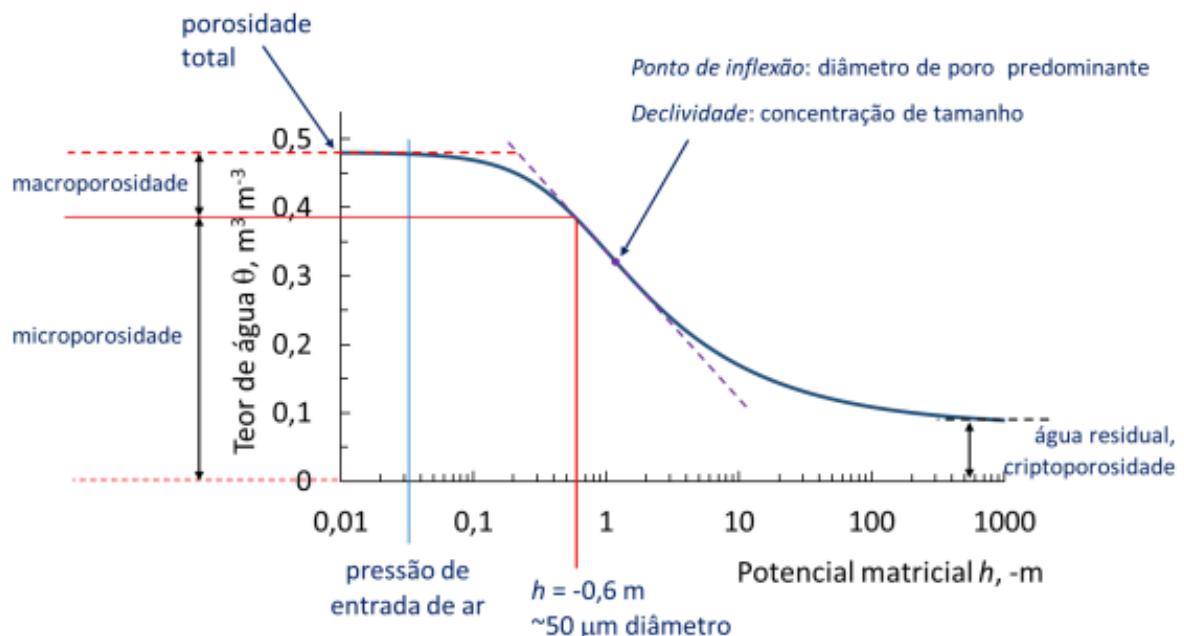


Figura 2.3 – Relação entre a energia potencial da água livre em um estado de referência padrão. Fonte [BRADY; WEIL, 2013]

Como o módulo do potencial matricial ($|h|$), varia no campo desde zero na saturação até valores da ordem de 1000m para o solo muito seco, é comum que seus valores sejam expressos na escala pF , em que $pF = \log|h|$, para h expresso em cm. Outras unidades (kPa, m, cm) podem ser utilizadas sem transformação numa escala logarítmica. A curva inicia no teor de água da saturação (porosidade total) junto ao eixo-Y para o menor valor de $|h|$ representado. O início da curva é horizontal ($d\theta/dh = 0$), mas ela começa a decrescer em algum potencial denominado de pressão de entrada de ar (valor de entrada do ar) ou pressão de borbulhamento. A partir daí a inclinação $d\theta/dh$ aumenta até chegar num máximo no ponto de inflexão, o limite entre a parte convexa e côncava da curva. O potencial associado ao ponto de inflexão corresponde ao diâmetro de poro predominante. A declividade nesse ponto indica a concentração maior ou menor de poros ao redor desse diâmetro [LIER, 2020].

2.3 Equações de ajuste para a curva de retenção

Equações empíricas foram propostas para a curva de retenção e podem ser classificadas como equações com dois, três ou mais parâmetros. As principais expressões de ajuste para a curva de retenção referentes aos modelos dos seguintes autores: Gardner (1958), Brooks e Corey (1964), Van Genuchten (1980) e Fredlund e Xing (1994) [SILVA, 2020].

2.3.0.1 Gardner(1958)

$$\theta_d = \frac{1}{1 + a_g h^{n_g}} \quad (2.1)$$

Onde:

$$\theta_d = \frac{w(h)}{w_s}$$

a_g = parâmetro de ajuste da função do valor de entrada do ar (AEV);

n_g = parâmetro de ajuste da função da taxa de dessaturação além do valor de entrada do ar (AEV).

2.3.0.2 Brooks & Corey (1964)

Para $\psi \leq \psi_{aev}$

$$w(\psi) = w_s \text{ ou } \theta_n = 1 \quad (2.2)$$

Para $\psi > \psi_{aev}$

$$\theta_n = \left[\frac{\psi}{\psi_{aev}} \right]^{-\lambda_{bc}} \quad (2.3)$$

Onde:

$$\theta_n = \frac{\psi(h) - w_r}{w_s - w_r}$$

ψ_{aev} é valor do potencial matricial de entrada de ar do solo;

λ_{bc} é o índice de distribuição do tamanho dos poros; w_r é o teor de água residual.

2.3.1 Van-Genuchten (1980)

$$\theta_n = \frac{1}{[1 + (a_{vg}\psi)^{n_{vg}}]^{m_{vg}}} \quad (2.4)$$

Onde:

$$\theta_n = \frac{\psi(h) - w_r}{w_s - w_r}$$

a_{vg} é o parâmetro de ajuste relacionado ao inverso do AEV;

n_{vg} é o parâmetro de ajuste relacionado à taxa de dessaturação do solo além do AEV;

m_{vg} é o parâmetro de ajuste relacionado principalmente às condições residuais.

2.3.2 Fredlund & Xing (1994)

$$w(\psi) = C(\psi) \frac{w_s}{\left\{ \ln \left[e \left(\frac{\psi}{a_f} \right)^{n_f} \right] \right\}^{m_f}} \quad (2.5)$$

Onde:

$$C(\psi) = 1 - \frac{\ln \left(1 + \frac{\psi}{\psi_r} \right)}{\ln \left(1 + \frac{10^6}{\psi_r} \right)}$$

a_f parâmetro de ajuste que é relacionado principalmente ao AEV;

n_f parâmetro de ajuste que é relacionado principalmente à taxa de dessaturação do solo além do AEV;

m_f parâmetro de ajuste que é relacionado principalmente ao teor de umidade residual;

$C(\psi)$ fator de correção que é relacionado principalmente à sucção correspondente ao teor de umidade residual.

2.4 Condutividade hidráulica

A análise da condutividade hidráulica é de extrema importância, como por exemplo, nos estudos de estabilidade de taludes, nas análises sobre contaminação das águas subterrâneas ou de projetos de barragens de terra. A condutividade hidráulica pode ser classificada em dois tipos: análises de fluxo em estado estacionário e transiente. No estado estacionário, as condições não mudam com o tempo. Portanto, o fluxo de água no solo é constante e as propriedades do solo, como a condutividade hidráulica, não variam ao longo do tempo. Já no estado transiente, as condições no solo variam com o tempo. Isso ocorre em situações como chuva intensa, irrigação ou após uma mudança nas condições climáticas. [GERSCOVICH, 2011].

Nas análises transientes, a carga hidráulica e a condutividade hidráulica podem mudar em relação ao tempo por causa das variações nas condições de contorno. Nas análises estacionárias, a carga hidráulica e a condutividade hidráulica não sofrem alterações em função do tempo, em qualquer ponto da massa de solo. Desta forma, é necessário o conhecimento da condutividade Hidráulica (k_w) para as análises, pois este é responsável por regular a taxa de fluxo de água [GERSCOVICH, 2011]. Em solos não saturados, o k_w é representado por uma função matemática, tendo como variável o grau de saturação ou o estado de tensões, em especial, quando a sucção é alterada além do AEV [SILVA, 2020].

$$k_w = k_w(S, e) \quad (2.6)$$

$$k_w = k_w(S, w) \quad (2.7)$$

$$k_w = k_w(w, e) \quad (2.8)$$

Onde:

e é o índice de vazios;

S é o grau de saturação;

w é o teor de água gravimétrico.

A granulometria e a plasticidade são outros fatores que também afetam a condutividade hidráulica [GERSCOVICH, 2011]. Para ter elevados valores de condutividade hidráulica os solos devem ser compostos predominantemente por partículas grossas mais grosseiras (área, por exemplo) e com uma distribuição granulométrica mais uniforme, devido à existência de vazios com grandes diâmetros. Por outro lado, para ter baixa condutividade hidráulica os solos precisam ter partículas mais finas, como argilas de alta plasticidade, os vazios devem ser menores, juntamente com a elevada superfície específica e a composição química e mineralógica, que são responsáveis por uma maior retenção de água, causada por não encontrar facilidade de transitar nos poros [SILVA, 2020].

2.4.1 Métodos de estimativa da condutividade hidráulica em solos não saturados

Esses procedimentos de estimativa realizam uma associação entre o início da dessaturação e a redução do k_w baseando-se na curva retenção e na condutividade hidráulica (k_s). A um solo saturado é atribuído o maior k_w que começa a diminuir quando a sucção supera o AEV, ou seja, o grau de saturação passa a ser menor que 100%. Após as condições residuais, o fluxo de água líquida cessa, predominando o fluxo de vapor.

2.4.1.1 Gardner (1958)

Gardner (1958) propôs a seguinte relação matemática entre a condutividade hidráulica de solos não saturados e a sucção matricial:

$$k_w(u_a - u_w) = \frac{k_s}{1 + a_g \left\{ \frac{u_a - u_w}{\rho_w g} \right\}^{n_g}} \quad (2.9)$$

Onde:

g é o aceleração da gravidade;

ρ_w é a densidade da água;

n_g é o parâmetro de ajuste relacionado à taxa de dessaturação do solo;

a_g é o parâmetro de ajuste relacionado ao inverso do AEV.

Essa expressão, contudo, não atende aos requisitos de uma função de estimativa, pois os seus parâmetros são resultantes de uma análise de regressão de dados experimentais, não podendo ser usada sem que seja possível determiná-los previamente [SILVA, 2020].

2.4.2 Brooks & Corey (1964)

Brooks e Corey (1964) elaboraram um modelo empírico dividido em duas partes, as quais envolvem a identificação do coeficiente de permeabilidade abaixo e acima do AEV.

Na região saturada:

Abaixo do AEV ($u_a - u_w \leq (u_a - u_w)_b$), o k_w é igual ao k_s :

$$k_w = k_s \quad (2.10)$$

Acima do AEV ($u_a - u_w > (u_a - u_w)_b$), o k_w a função é dada por:

$$k_w = k_s \left\{ \frac{(u_a - u_w)b}{u_a - u_w} \right\}^{2+3\lambda} \quad (2.11)$$

Onde:

$(u_a - u_w)_b$ é a succção matricial de entrada de ar;

λ é o índice de distribuição do tamanho dos poros.

2.4.2.1 Van-Genuchten (1980)

Van-Genuchten (1980) constatou que, caso sua função de três parâmetros para a curva de retenção pudesse ser reduzida para uma de dois parâmetros. Amparado nas diferentes metodologias de integração elaboradas por Burdine (1953) e por Mualem (1976), Van Genuchten (1980) relacionou os parâmetros de ajuste m_{vb} e m_{vm} de acordo com as Equações (2.12) e (2.13) [SILVA, 2020].

$$m_{vb} = 1 - \frac{2}{n_{vb}} \quad (2.12)$$

$$m_{vm} = 1 - \frac{1}{n_{vm}} \quad (2.13)$$

Essas relações deram origem a duas funções de condutividade hidráulica: uma baseada nas teorias de Burdine (1953) e outra alicerçada nas idealizações de Mualem (1976), segundo as Equações (2.14) e (2.15), respectivamente.

$$k_r(\psi) = \frac{k_w(\psi)}{k_s} = \frac{1 - (a_{vb}\psi)^{n_{vb}-2} [1 + (a_{vb}\psi)^{n_{vb}}]^{-m_{vb}}}{[1 + (a_{vb}\psi)^{2n_{vb}}]} \quad (2.14)$$

$$k_r(\psi) = \frac{k_w(\psi)}{k_s} = \frac{\{1 - (a_{vm}\psi)^{n_{vm}-1} [1 + (a_{vm}\psi)^{n_{vm}}]^{-m_{vm}}\}^2}{[1 + (a_{vm}\psi)^{2n_{vm}}]^{0,5}} \quad (2.15)$$

Onde:

k_r é o coeficiente relativo de permeabilidade;

m_{vb} , n_{vb} e a_{vb} são parâmetros de ajuste do modelo de Van Genuchten (1980) – Burdine (1953);

m_{vm} , n_{vm} e a_{vm} são parâmetros de ajuste do modelo de Van Genuchten (1980) – Mualem (1976).

2.4.3 Fredlund, Xing e Huang (1994)

Fredlund, Xing e Huang (1994) utilizaram a equação de Fredlund e Xing (1994) para a curva de retenção em conjunto com o modelo físico de Childs e Collis – George (1950), com a intenção de calcular a função de condutividade hidráulica a partir da execução de uma integração numérica ao longo da curva de retenção. Considerou constante o volume do solo e manteve a independência dos parâmetros de ajuste m_f , n_f e a_f e da curva de retenção. A expressão elaborada pode ser definida de acordo com a Equação (2.16) [SILVA, 2020].

$$k_r(\psi) = \frac{\int_{\psi}^{\psi_r} \frac{\theta(y) - \theta(\psi)}{y^2} \theta'(y) \cdot dy}{\int_{\psi_{eav}}^{\psi_r} \frac{\theta(y) - \theta_s}{y^2} \theta'(y) \cdot dy} \quad (2.16)$$

Onde:

ψ_r é a sucção total residual;

ψ_{eav} sucção total de entrada de ar;

y é a variável de integração, representando a sucção.

O termo θ' da Equação (2.16) corresponde à derivada da função de Fredlund e Xing (1994) que descreve a curva de retenção em toda a faixa de sucção.

Em cada um dos modelo é utilizado um número limitado de parâmetros, condicionando sua aplicação a uma seleção prévia de informações. Como alternativa, os métodos estatísticos não necessitam de parâmetros pré-definidos, podendo ser utilizados os parâmetros obtidos.

REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNAs)

3.1 Neurônios artificiais

Uma rede neural consiste em uma estrutura onde as diferentes regiões cerebrais trabalham simultaneamente para produzir cognição, construindo um processamento distribuído por muitas unidades intensamente interligadas. Esse processo busca entender e emular as propriedades decorrentes do alto grau de paralelismo e conectividade dos sistemas biológicos [FURTADO, 2019].

A rede neural pode ser entendida como um processador que é distribuído de forma maciça e paralela, formada por unidades de processamento simples, que tem a capacidade natural de armazenar conhecimento experimental e torná-lo disponível para o uso [HAYKIN, 2001]. Desta forma, uma rede neural é composta por um elevado número de elementos processadores chamados de neurônios, altamente interligados por conexões com um valor que estabelece o grau de conectividade, denominado peso da conexão ou sinapse [FURTADO, 2019].

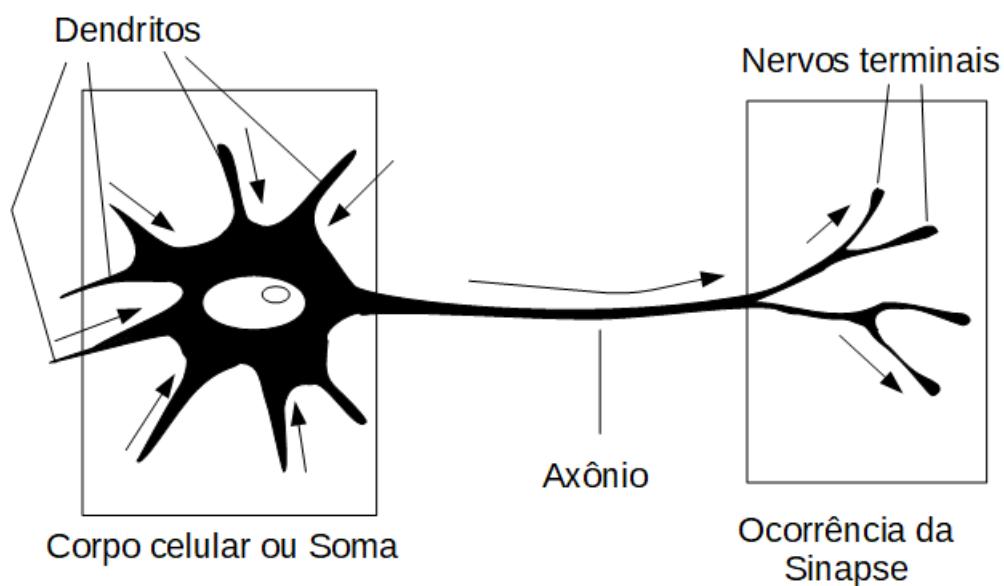


Figura 3.1 – Exemplo de um neurônio. Adaptado de [GONÇALVES, 2017]

A partir da estrutura e funcionamento do neurônio biológico, pesquisadores tentaram simular este sistema no computador. Os neurônios artificiais são construções lógico-matemáticas

que tentam simular a forma, o comportamento e a função dos neurônios biológicos. Na comparação do neurônio biológico com o artificial, os dendritos podem ser atribuídos às entradas, o corpo celular (soma) ao processamento e os axônios às saídas. Um neurônio é, portanto, considerado uma unidade fundamental de processamento de informações [FURTADO, 2019].

No neurônio artificial, as entradas fazem ligações com o corpo celular artificial, realizadas através de canais de comunicação que estão associados a um determinado peso, simulando as sinapses. Os estímulos captados pelas entradas são processados pela função da soma (combinador linear), e o limiar de disparo do neurônio biológico é substituído pela função de transferência. A Figura 3.2 apresenta esquematicamente um neurônio de McCulloch & Pitts [BRAGA, 2000].

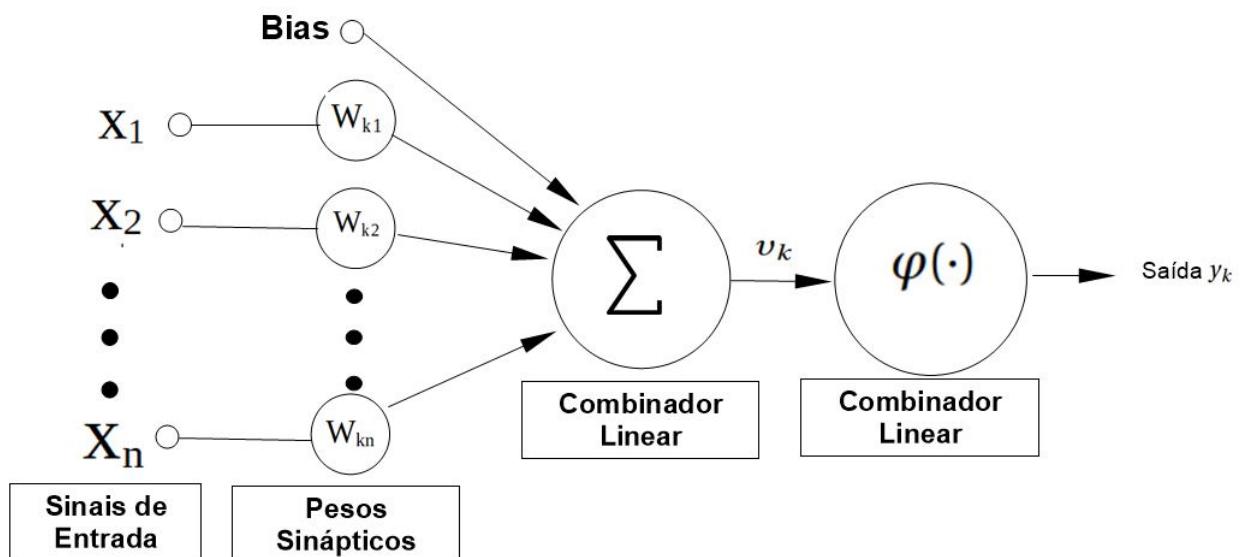


Figura 3.2 – Exemplo de um modelo RNA. Adaptada de [FURTADO, 2019]

O neurônio de McCulloch e Pitts, apesar de simples, ainda é utilizado. A Figura 3.1 representa a forma artificial desse neurônio, onde os x_i representam os valores de entrada, k representa os índices do neurônio em questão, os W_{ki} são os pesos sinápticos, o v_k é o combinador linear, o $\varphi(\cdot)$ é a função de ativação e o y_k é o valor de saída.

O combinador linear v_k é o somatório do produto entre valores de entrada x_i e pesos sinápticos W_{ki} . Matematicamente, é representado por:

$$v_k = \sum_{j=1}^m W_{kj} \cdot x_i \quad (3.1)$$

Onde m é o número de sinais de entrada incidentes no neurônio k . Posteriormente, o valor de saída será a função de ativação de cada combinador linear.

$$y_k = \varphi(v_k) \quad (3.2)$$

Para uma maior flexibilidade computacional cada neurônio também é estimulado por uma polarização constante chamada “bias” (b_k), constante de valor 1, transmitida ao neurônio através da sinapse $w_{0,i}$. Dessa forma, a Equação (3.2) é complementada:

$$y_k = \varphi(v_k + b_k) \quad (3.3)$$

A função de ativação é a transformação não linear que é feita ao longo do sinal de entrada. Quando não temos a função de ativação, os pesos e bias simplesmente fazem uma transformação linear. Entre as funções de ativação, as que merecem destaque são as funções Sigmoide, Tangente Hiperbólica (TanH), Unidade Linear Retificada (ReLU), Unidade Linear Exponencial (ELU) e Unidade Linear Retificada com Vazamento [ALVES, 2017].

3.1.1 Ativação Sigmoide

A função sigmoide ou logística é dada pela Equação (3.4):

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (3.4)$$

Até pouco tempo atrás, a função sigmoides era a mais utilizada em RNAs, por serem biologicamente mais plausível. A Figura 3.3 é a representação gráfica da função sigmoide.

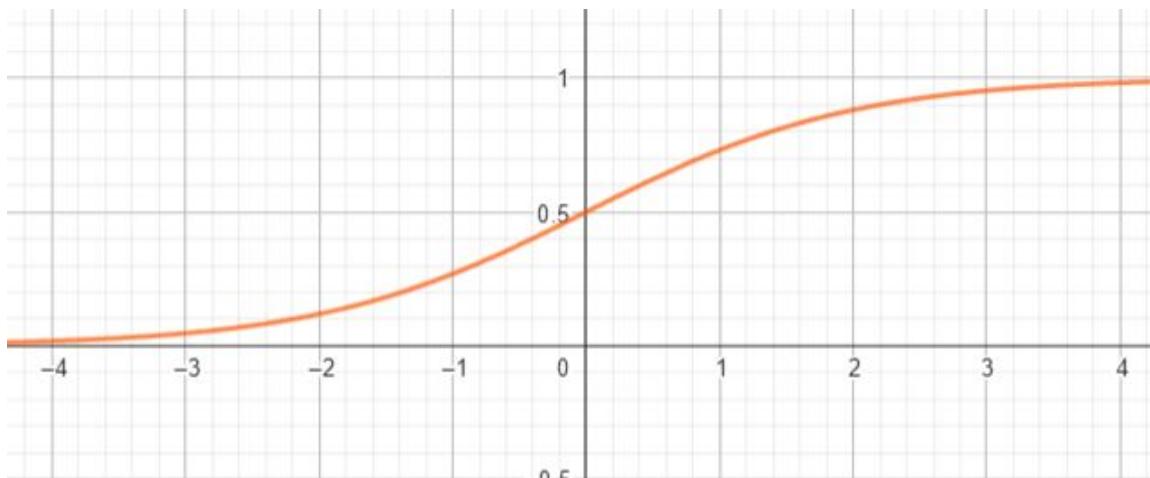


Figura 3.3 – Exemplo de uma função sigmoide

3.1.2 Ativação Tangente Hiperbólica (TanH)

A função TanH também tem um formato de ‘S’, mas varia de -1 a 1, diferente da sigmoide que varia de 0 a 1. A TanH se aproxima mais da identidade e, por isso, é uma alternativa mais atraente do que a sigmoide para servir de ativação às camadas ocultas das RNAs [ALVES, 2017]. A TanH é dada pela Equação (3.5):

$$\tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (3.5)$$

A figura 3.4 é a representação gráfica da função TanH.

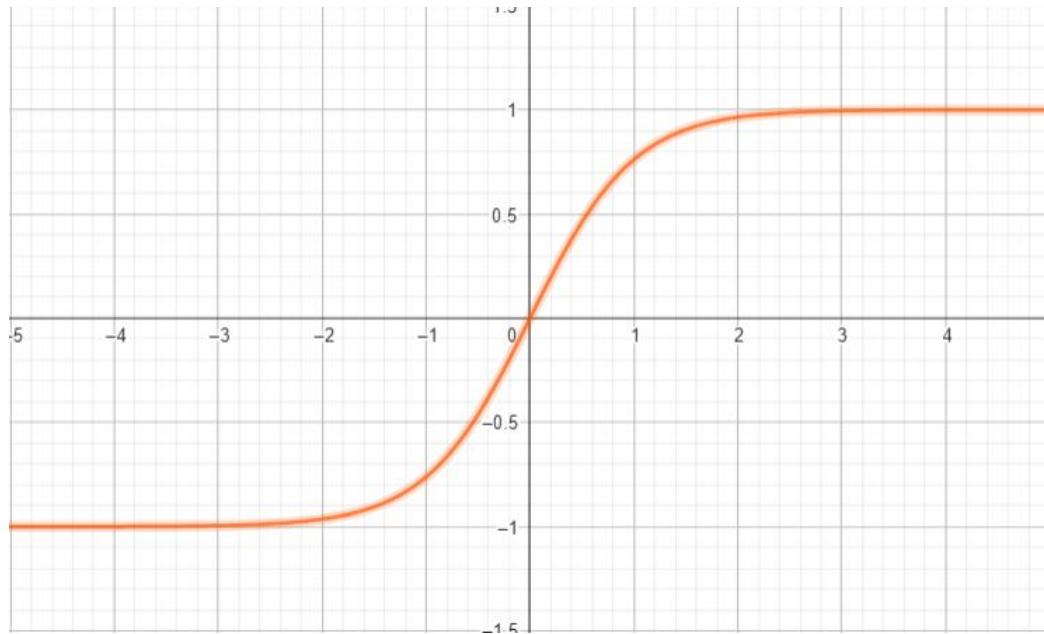


Figura 3.4 – Exemplo de uma função TanH

3.1.3 Ativação linear retificada (ReLU)

A ativação ReLU é dada pela Equação (3.6):

$$ReLU(x) = \max\{0, x\} \quad (3.6)$$

Redes com a função ReLU são fáceis de otimizar, já que a ReLU é extremamente parecida com a função identidade. A única diferença é que a ReLU produz zero em metade do seu domínio [ALVES, 2017]. A Figura 3.5 é a representação gráfica da função ReLU.

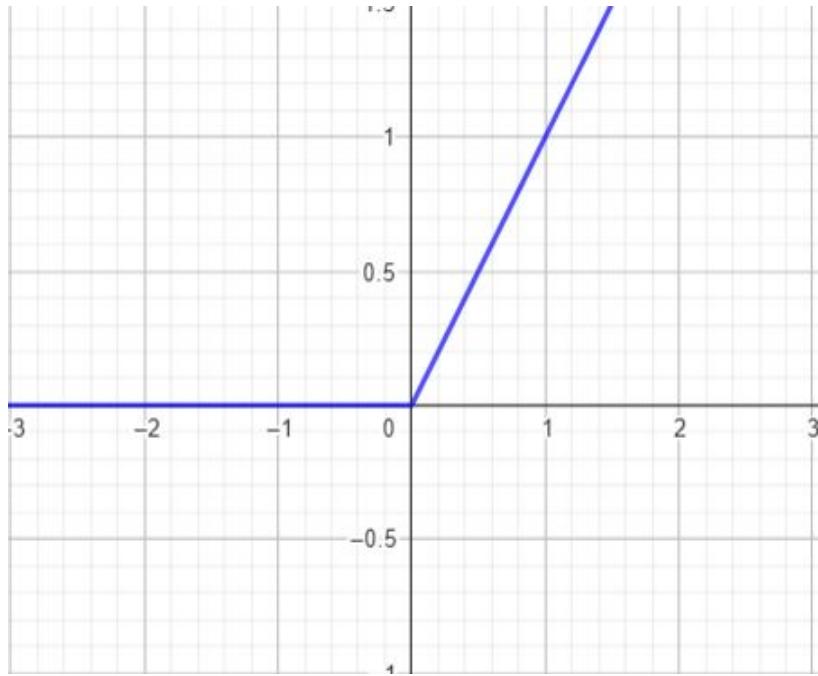


Figura 3.5 – Exemplo de uma função ReLU

A ativação ReLU é muito mais eficiente do que as funções sigmoidais, mas a grande desvantagem da ReLU é que, se a soma pondera antes da aplicação da ReLU se torna negativa, os parâmetros W_K da unidade deixem de ser atualizados com gradiente descendente.

3.1.4 Ativação Ativação Leaky ReLU

A ativação Leaky ReLU é uma forma de corrigir o erro da ativação ReLU inserindo uma constante α na Equação (3.7):

$$\text{LeakyReLU}(x, \alpha) = \max\{\alpha x, x\} \quad (3.7)$$

Dessa forma, a ativação Leaky ReLU continua parecida com a identidade, sendo que agora, derivada na região negativa ainda é positiva [ALVES, 2017]. A Figura 3.6 é a representação gráfica da função Leaky ReLU.

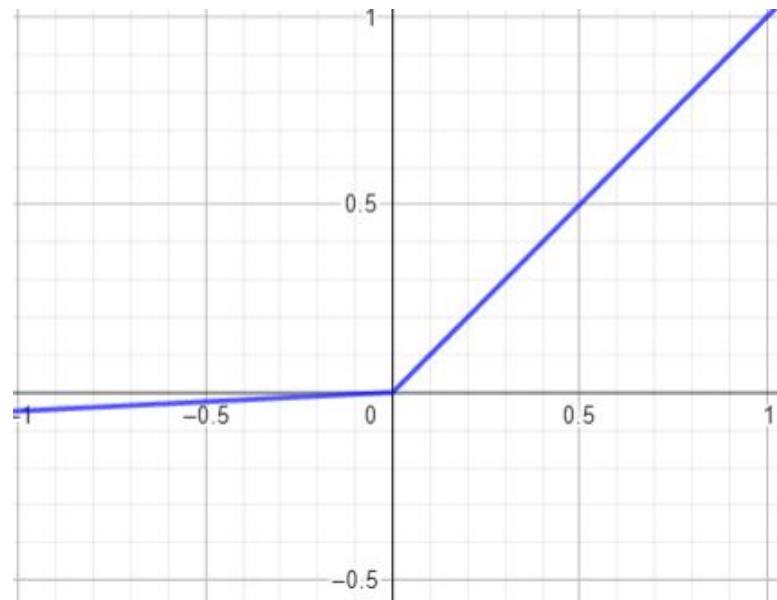


Figura 3.6 – Exemplo de uma função Leaky ReLU

3.1.5 Unidade linear exponencial (ELU)

A ativação da unidade linear exponencial (ELU) é dada pela Equação (3.8).

$$ELU(x, \alpha) = \begin{cases} x, & \text{se } x \geq 0, \\ \alpha(e^x - 1), & \text{se } x < 0 \end{cases} \quad (3.8)$$

A figura 3.7 é a representação gráfica da função ELU.

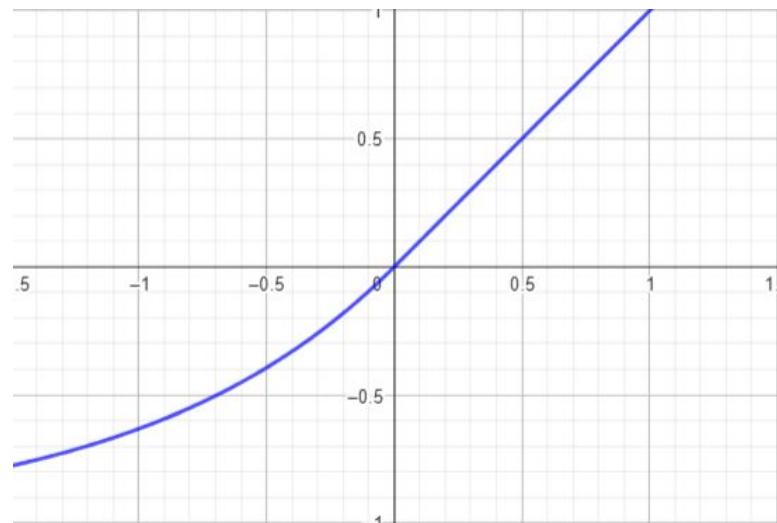


Figura 3.7 – Exemplo de uma função ELU

A ativação ELU resolve o problema de unidades ‘mortas’ apresentado pelas ReLUs. Assim, a ELU é a mais recomendada para ser usada como ativação [ALVES, 2017]

3.2 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNA)

3.2.1 Perceptron

Segundo [KOVÁCS, 1996], Rosenblatt deu prosseguimento as ideias de McCulloch & Pitts criando uma rede de múltiplos neurônios, denominada rede de perceptron. Um perceptron é uma rede que possui seus neurônios postos em várias camadas, ligados pelo que é conhecido como conexões sinápticas. Os neurônios que recebem estímulos externos são chamados de neurônios de entrada, que correspondem aos neurônios dos órgãos sensoriais. São chamados de neurônios de saída os que possuem suas respostas usadas para mudar o mundo exterior, que correspondem aos neurônios biológicos que excitam os músculos. Os neurônios que estão nas camadas intermediárias (camada oculta), são chamados de internos e possuem grande importância, pois estão na camada onde é feita a maior parte do processamento. [KOVÁCS, 1996]. A Figura 3.8 representa essa rede.

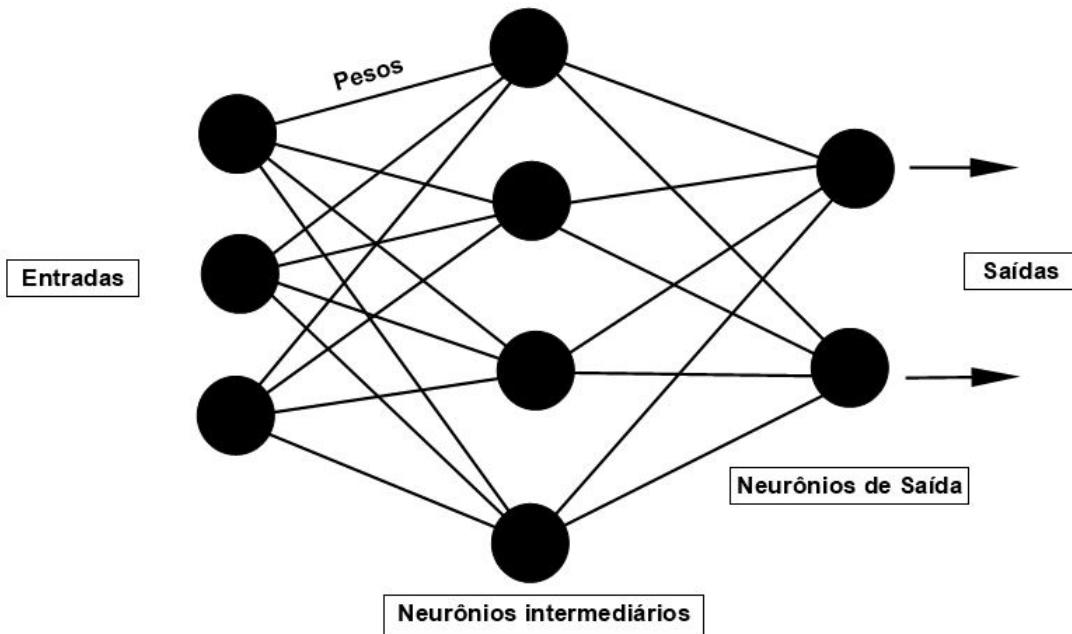


Figura 3.8 – Exemplo de uma RNA de múltiplas camadas. Adaptado de [ALVES, 2017]

O perceptron é construído em torno de um neurônio não-linear, que consiste de um combinador linear seguido por uma função de ativação, representados na figura 3.4. O objetivo do perceptron é classificar corretamente o conjunto de estímulos aplicados externamente aos nós x_i em uma das duas classes \mathcal{C}_1 e \mathcal{C}_2 . Se o valor de x_i gerar uma saída do perceptron $y_k = +1$ será associado a classe \mathcal{C}_1 , se a saída for $y_k = -1$ será atribuído a classe \mathcal{C}_2 [HAYKIN, 2001]. Os pesos sinápticos W_i do perceptron pode ser adaptados de iteração para interação a partir dessa classificação. Para isso, é usado a regra de correção de erro, conhecida como algoritmo de convergência do perceptron [HAYKIN, 2001].

As variáveis e parâmetros para esse algoritmo são:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$x(n) = [+1, x_1(n), x_2(n), \dots, x_m(n)]^T$$

$$w(n) = [b(n), w_1(n), w_2(n), \dots, w_m(n)]^T$$

$$b(n) = bias$$

$$y(n) = \text{resposta real (quantizada)}$$

$$d(n) = \text{resposta desejada}$$

$$\eta = \text{parâmetro de taxa de aprendizagem, uma constante positiva menor que a unidade}$$

O algoritmo de convergência do perceptron inicia fazendo $w(0) = 0$. Em seguida, no tempo n , ativa o perceptron aplicando o vetor de entrada de valores contínuos $x(n)$ e a resposta desejada $d(n)$. Posteriormente, calcula a resposta real do perceptron pela equação.

$$y(n) = \text{sinal}[w^T(n)x(n)] \quad (3.9)$$

Onde $\text{sinal}[]$ é a função sinal dada por:

$$\text{sinal}(v) = \begin{cases} +1, & \text{se } v > 0, \\ -1, & \text{se } v < 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

Onde v é o combinador linear.

Desta forma, a adaptação do vetor de pesos pode ser feita, atualizando o vetor peso do perceptron através da função:

$$w(n+1) = w(n) + \eta[d(n) - y(n)x(n)] \quad (3.11)$$

onde

$$d(n) = \begin{cases} +1, & \text{se } x(n) \text{ pertence à classe } \mathcal{C}_1 \\ -1, & \text{se } x(n) \text{ pertence à classe } \mathcal{C}_2 \end{cases} \quad (3.12)$$

Após esse cálculo, o algoritmo incrementa um no tempo e repetindo todo o processo.

Em alguns tipos de redes, os neurônios são organizados em forma de camadas, onde os nós da camada de entrada se comunicam diretamente com os nós da camada oculta, que por sua vez, se comunicam com os nós da camada de saída. Essa arquitetura é conhecida como redes *feedforward*, onde os neurônios se dispõem em camadas paralelas e consecutivas, se comunicando da entrada para a saída, não existindo portanto ligações entre os neurônios de uma mesma camada ou com camadas anteriores. Como há a camada oculta, dizemos que é uma rede *feedforward* de múltiplas camadas [HAYKIN, 2001]. Essas redes que possuem perceptron e *feedforward* de múltiplas camadas são conhecidas como redes de perceptron de múltiplas camadas (MLP)

3.2.2 PERCEPTRON DE MÚLTIPAS CAMADAS (MLP)

MLPs são redes alimentadas que possuem entre as camadas de entrada e de saída mais camadas de neurônios, chamadas de ocultas. Neste modelo todos os neurônios são ligados aos neurônios da camada seguinte, não havendo ligação com os neurônios da mesma camada e também não ocorre realimentação. A aprendizagem de uma rede neural MLP é um processo iterativo, conhecido como aprendizagem por experiência, onde padrões de treinamento são apresentados a rede e com base nos erros obtidos, há correções nos pesos sinápticos, com o intuito

de diminuir o erro nas próximas iterações [GONÇALVES, 2017]. A Figura 3.9 representa uma MLP.

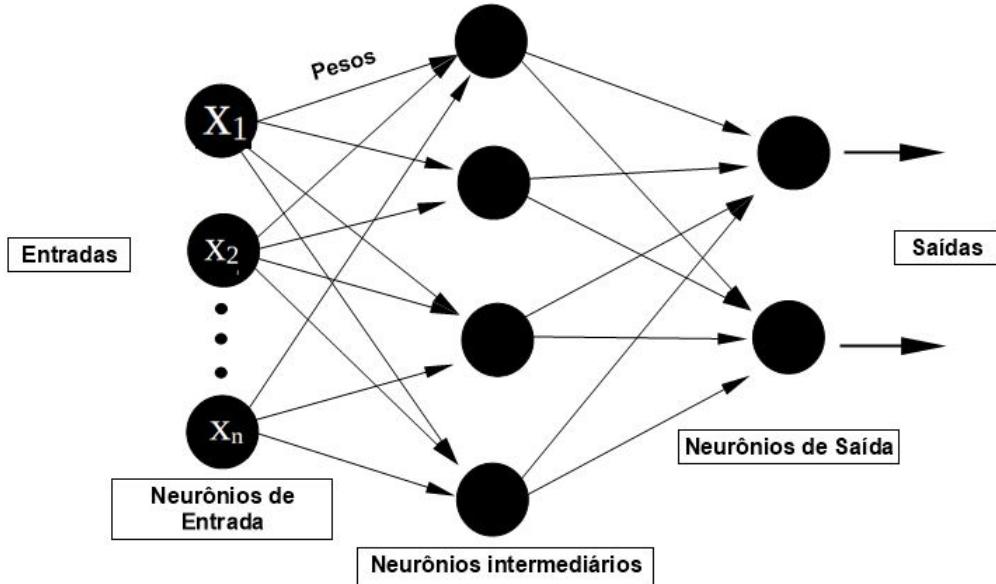


Figura 3.9 – Exemplo de uma MLP. Adaptada de [GONÇALVES, 2017]

O principal algoritmo de treinamento da MLP é o algoritmo de retropropagação de erro (*error backpropagation*), baseado na regra de aprendizagem por correção de erro, que consiste em passos um para frente e passos para trás. O passo para frente é chamado de propagação, onde os valores iniciados nos neurônios da camada de entrada são passados para as camadas ocultas e fulminam na camada de saída. Durante este passo os pesos sinápticos da rede são todos fixos [HAYKIN, 2001]. Os passos para trás são incumbidos de ajustar os pesos sinápticos, por meio do cálculo do erro realizado na camada de saída, os pesos sinápticos entre as camadas antecessoras são ajustados de acordo com uma regra de correção de erro [GONÇALVES, 2017].

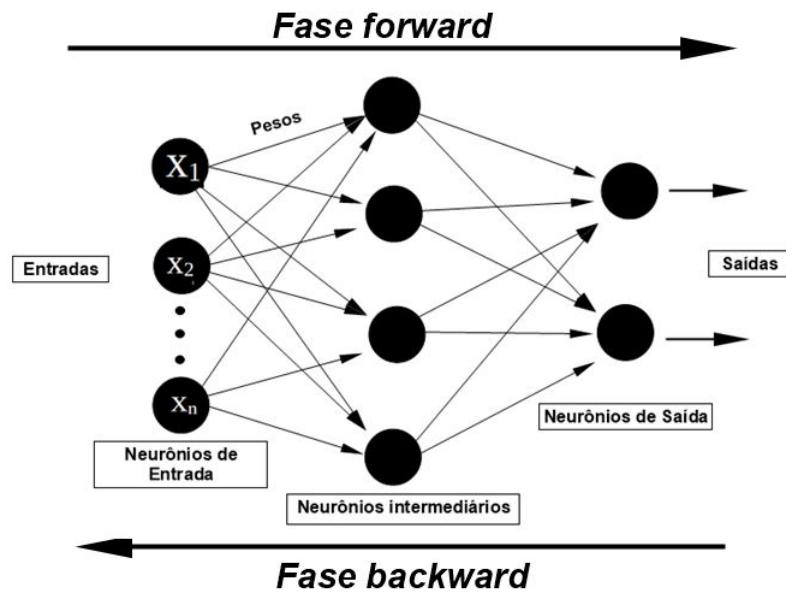


Figura 3.10 – Fluxo de processamento do algoritmo *back-propagation*. Adaptado de [GONÇALVES, 2017]

A fase *forward* (para frente) inicia apresentando a entrada à primeira camada da rede, a camada C^0 . Consequentemente, passa para cada camada C^i . Após os nós da camada C^i ($i > 0$) calcularem seus sinais de saída, estes são usados como entrada para a camada C^{i+1} definir suas saídas. Ao chegar à última camada, as saídas produzidas são comparadas às saídas desejadas. A fase *backward* (para trás) parte da última camada, até chegar na camada de entrada. Os nós da camada atual ajustam seus pesos de forma a reduzir seus erros. Os 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 [BRAGA, 2000].

O algoritmo *back-propagation* faz uso destas duas fases. Inicializa com os pesos e parâmetros, repetindo até o erro ser mínimo ou até a realização de um certo número de ciclos. Para cada padrão de treinamento X , define saída da rede através da fase *forward*. Então, compara as saídas produzidas com as saídas desejadas, gerando um erro. Com esse valor, o algoritmo volta atualizando pesos do nós de cada camada, que é chamada de fase *backward*. Este procedimento de aprendizado é repetido diversas vezes, até que, para todos os processadores da camada de saída e para todos os padrões de treinamento, o erro seja menor do que o especificado.

A fórmula de ajuste de pesos pode ser expressa pela equação:

$$w_{ji}(t+1) = w_{ji}(t) + \eta \delta_j(t) x_i(t) \quad (3.13)$$

Onde os pesos sinápticos (w_{ji}) são corrigidos atualizando seus valores em função do tempo (t) e η é o parâmetro da taxa de aprendizagem. O erro δ_j será definido pela Equação (3.14) se for um nó de saída ou pela Equação (3.15) se for um nó intermediário ou de entrada.

$$\delta_j = (d_j - y_j) f(\text{net}_j) \quad (3.14)$$

$$\delta_j = f(\text{net}_j) \sum_l \delta_l w_{lj} \quad (3.15)$$

Onde $\text{net}_j = \sum_{i=1}^n x_i w_{ji}$.

Nesse processo de aprendizagem, cada combinação de pesos e limiares pode corresponder a um ponto na superfície de solução. Considerando a altura de um ponto sendo diretamente proporcional ao erro associado a este ponto, a solução está nos pontos mais baixos da superfície. O algoritmo de *back-propagation* usa o gradiente descendente para tentar minimizar o erro recebido da rede ajustando os pesos e limites para corresponder às coordenadas do ponto mais baixo na superfície de erro. O gradiente de uma função está na direção e sentido em que a função possui uma taxa de variação máxima, o que garante que a rede caminha na superfície na direção que vai reduzir mais o erro obtido. Este método certamente encontra a solução com erro mínimo para superfícies simples. Para superfícies mais complexas, esta garantia não mais existe, podendo levar o algoritmo a convergir para mínimos locais. O algoritmo *back-propagation* fornece uma aproximação da trajetória no espaço de pesos calculado pelo método do gradiente descendente. Estes pontos ou áreas podem incluir platôs, mínimos locais ou aresta.

Assim, uma MLP possui como principais características a habilidade de reconhecer e aprender as relações fundamentais entre as entradas e a saída, sem levar em consideração a dimensionalidade dos dados e a não-linearidade do sistema e possui alta tolerância para dados ruidosos (noise data). Por outro lado possui limitações como: o sucesso depende da qualidade e quantidade de dados disponível para treinamento; ausência de regras claras e procedimentos efetivos para determinação da arquitetura ótima; a incapacidade de explicar de forma compreensível como são obtidas as respostas, dado um conjunto novo de entrada [GONÇALVES, 2017].

Para que uma MLP possa obter bons resultados na aplicação em problemas reais, uma boa configuração da mesma deve ser feita. Para evitar dificuldades com a implementação da MLP, valores ideais dos vários parâmetros da rede devem ser utilizados, porém estes valores não são de fácil obtenção. Desta forma, alguns parâmetros são determinados por tentativa e erro, analisando os resultados obtidos, a melhor configuração é escolhida [GONÇALVES, 2017].

Para iniciar a estrutura da MLP, o número de neurônios na camada oculta pode ser estimado pelo método de Fletcher-Gloss [GONÇALVES, 2017], dado pela expressão:

$$2\sqrt{n} + n_2 \leq n_1 < 2n + 1 \quad (3.16)$$

Onde n é o número de neurônios na camada de entrada, n_1 é o número de neurônios na camada oculta e n_2 são os neurônios na camada de saída. A partir desses valores, a busca pelo melhor modelo é na tentativa e erro, observando os resultados.

Resultados e Discussões

As oito variáveis do banco de dados são:

- (a) Índice de vazios inicial (e_o) adimensional;
- (b) Teor de umidade gravimétrico inicial (w_0) ou Teor de umidade volumétrico variando com a sucção matricial (θ), em %;
- (c) Fração de argila (C), em %;
- (d) Fração de silte (M), em %;
- (e) Fração de areia (S), em %;
- (f) Índice de plasticidade (IP) em %;
- (g) Coeficiente de permeabilidade hidráulica saturado (k_{sat}), em cm/s;
- (h) Sucção matricial ($u_a - u_w$), em kPa.
- (i) Coeficiente de permeabilidade hidráulica (k_w), em cm/s.

A distribuição de cada variável pode ser observada na Figura 4.1.

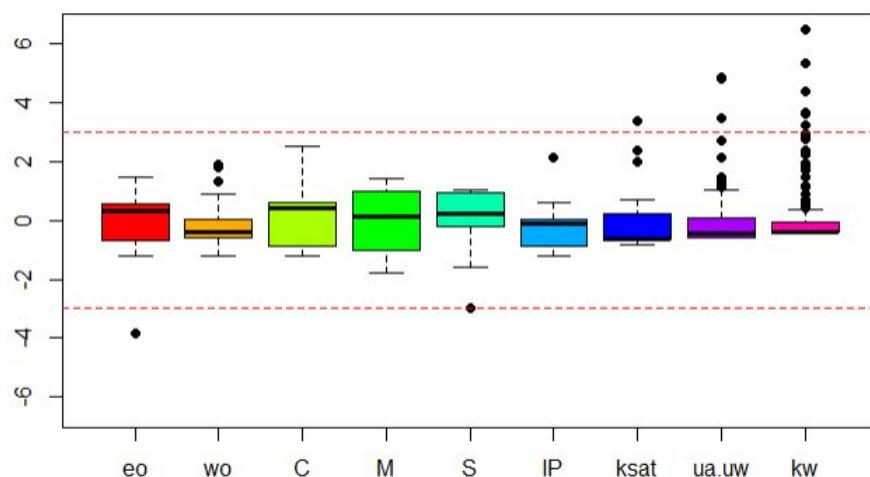


Figura 4.1 – Boxplot das variáveis

As variáveis Índice de vazios inicial (e_o) e Fração de silte (M) são as que apresentaram maior proximidade com a distribuição normal. As variáveis Sucção matricial ($u_a - u_W$) e Coeficiente de permeabilidade hidráulica (k_w) foram as que apresentaram maiores números de *outliers* e uma distribuição mais assimétrico.

O modelo proposto inicialmente é o modelo que pretende parametrizar o valor da permeabilidade hidráulica (k_w), a partir das oito variáveis citadas. A MLP demonstrou a seguinte configuração:

$(eo, wo, IP, ksat, C, M, S, ua.uw)$

Observando esses erros, as MLPs que apresentaram os menores valores foram as com duas camadas ocultas. Dentre essas, as que melhoraram se destacaram a apresentadas a seguir.

4.1 Modelos com todas as variáveis

4.1.1 MLP(5,4)

A Figura 4.2 mostra a estrutura da MLP com 5 neurônios na primeira camada e 4 na segunda camada.

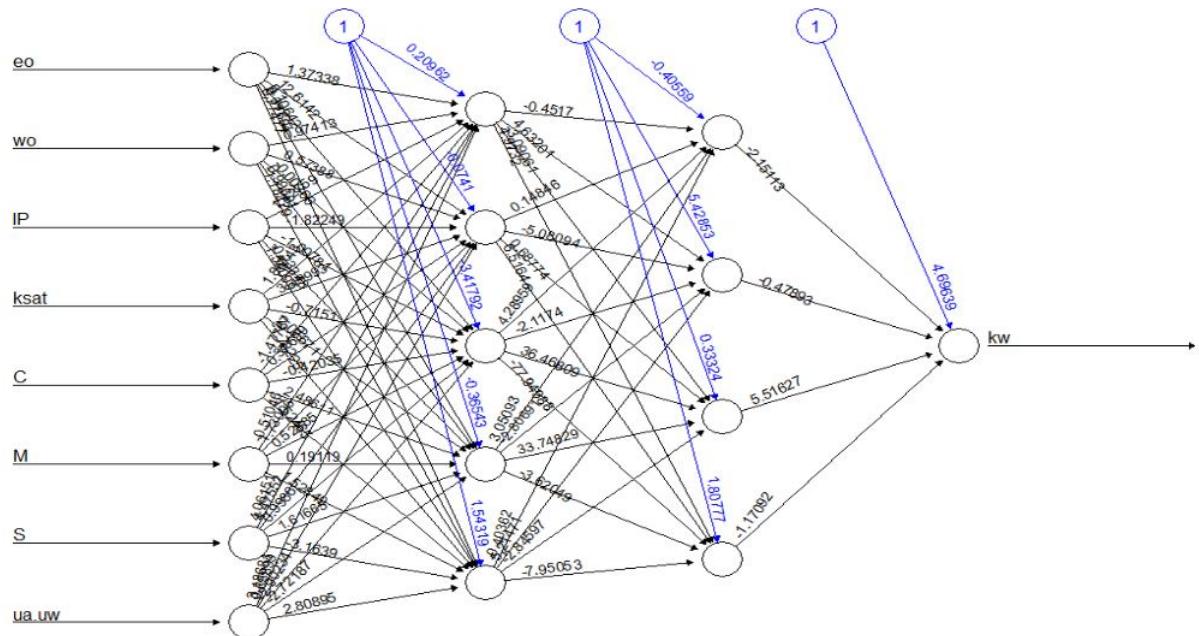


Figura 4.2 – MLP com 5 e 4 neurônios nas camadas ocultas

Os erros da MLP são demonstrados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 = Métricas de Previsão

Erro	Valor
MAE	0.1775952
MAPE	0.4912771
RMSE	0.4473496

4.1.2 MLP(6,4)

A Figura 4.3 mostra a estrutura da MLP com 6 neurônios na primeira camada e 4 na segunda camada.

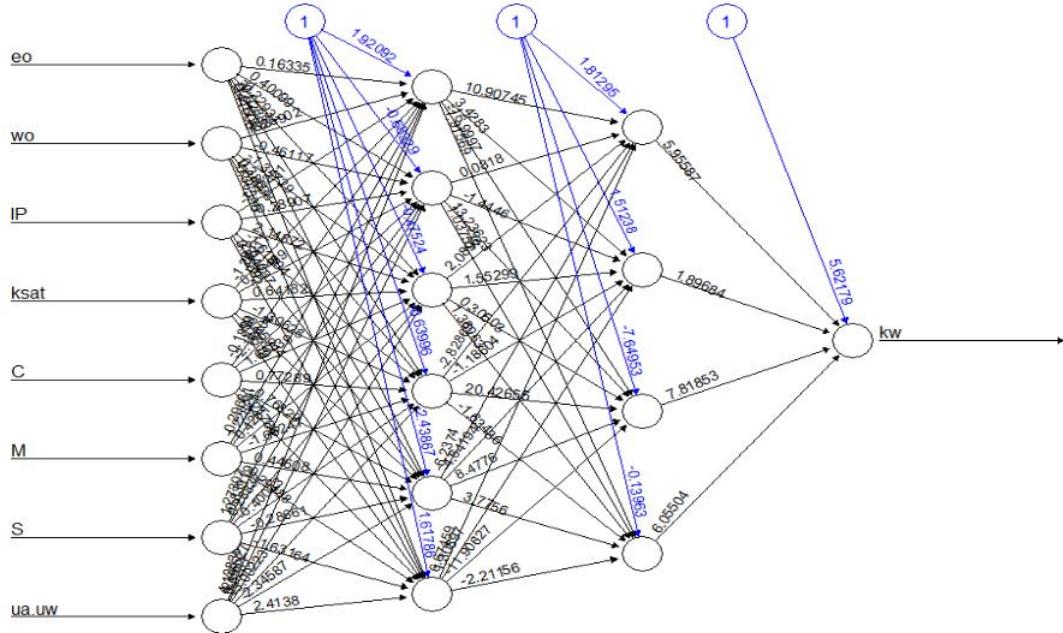


Figura 4.3 – MLP com 6 e 4 neurônios nas camadas ocultas

Os erros da MLP são demonstrados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2 – Métricas de Previsão.

Erro	Valor
MAE	0.162729
MAPE	0.5294337
RMSE	0.4414504

4.1.3 MLP(7,4)

A Figura 4.4 mostra a estrutura da MLP com 7 neurônios na primeira camada e 4 na segunda camada.

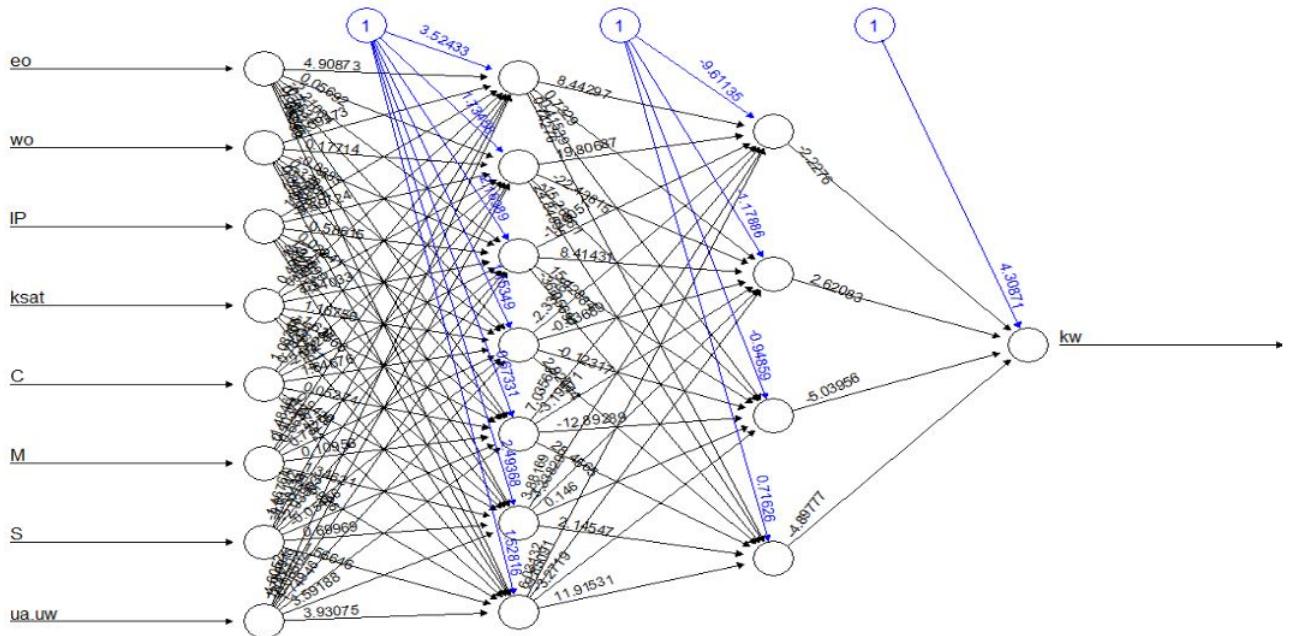


Figura 4.4 – MLP com 7 e 4 neurônios nas camadas ocultas

Os erros da MLP são demonstrados na tabela 4.3.

Tabela 4.3 – Métricas de Previsão.

Erro	Valor
MAE	0.1861921
MAPE	0.685676
RMSE	0.4637262

Os modelos MLP(5,4), MLP(6,4) e MLP(7,4) possuem a mesma quantidade de neurônios na segunda camada, e seus erros estão próximos. A Tabela 4.4 compara os erros dos três modelos propostos. A MLP que possui 6 e 4 neurônios na camada oculta possuem os menores erros, consequentemente, o melhor desempenho.

Tabela 4.4 – Comparaçao dos erros

Erro	MLP(5,4)	MLP(6,4)	MLP(7,4)
MAE	0.1775952	0.162729	0.1861921
MAPE	0.4912771	0.5294337	0.685676
RMSE	0.4473496	0.4414504	0.4637262

Os erros, principalmente o MAPE e o RMSE, indicam a necessidade de analisar outras estruturas e configurações para melhorar ainda mais seus resultados. Excluir algumas das variáveis, mudar o número de camadas ocultas, usar as diferentes funções de ativação, entre outras, pode ser uma forma de melhor esse modelo.

4.2 Modelos com menos de oito variáveis

Durante a análise, foram testadas várias combinações entre as oito varáveis, eliminando um, duas ou três em cada modelo. Após calcular os erros, só foram selecionadas as combinações

com os menores erros. As três combinações selecionadas estão descritas a seguir.

4.2.1 MLP5(6,4)

A análise realizada excluindo a fração de argila (C), fração de silte(M) e a fração de areia (S) esta demonstrada na Figura 4.5 que mostra a melhor estrutura da MLP com 6 neurônios na primeira camada e 4 na segunda camada.

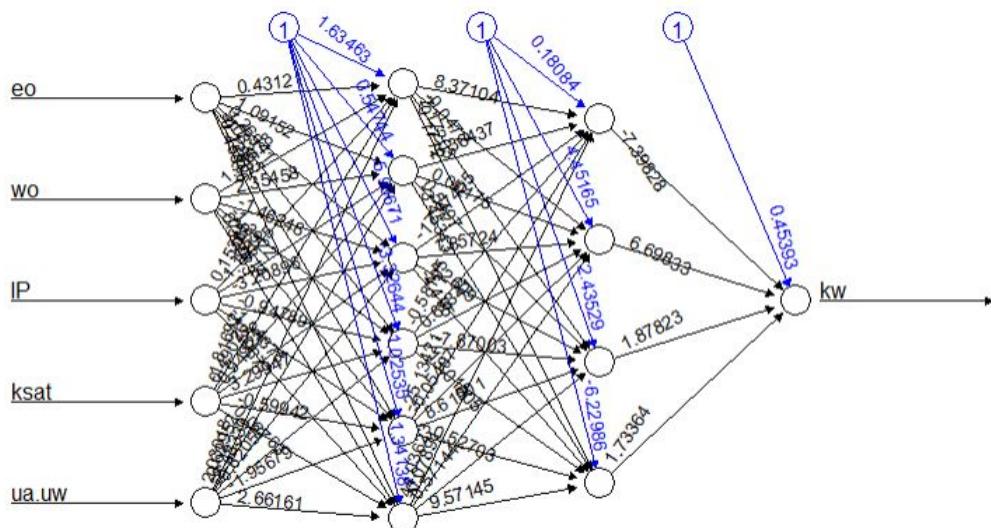


Figura 4.5 – MLP com 6 e 4 neurônios nas camadas ocultas

Os erros da MLP são demonstrados na tabela 4.5.

Tabela 4.5 – Métricas de Previsão.

Erro	Valor
MAE	0.1782465
MAPE	0.3514599
RMSE	0.708868

4.2.2 MLP7(5.11) - Sem silte

A segunda combinação com melhor desempenho foi o modelo com 7 variáveis excluindo apenas a fração de silte(M). A melhor estrutura dessa MLP foi com 5 neurônios na primeira camada e 11 na segunda camada. Os erros da MLP são demonstrados na Tabela 4.6.

Tabela 4.6 – Métricas de Previsão.

Erro	Valor
MAE	0,06178453
MAPE	0,3211416
RMSE	0,1250266

4.2.3 MLP7(6,1) - Sem Argila

A terceira melhor combinação entre as variáveis foi a formada com 7 variáveis, excluindo apenas a fração de argila(C). A Figura 4.6 mostra a melhor estrutura dessa MLP com 6 neurônios na primeira camada e 4 na segunda camada.

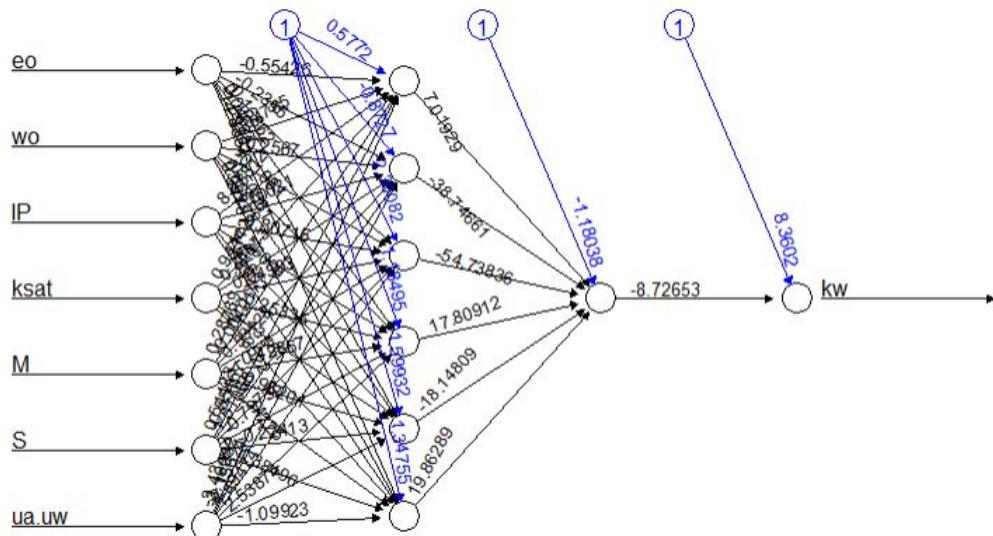


Figura 4.6 – MLP com 6 e 1 neurônios nas camadas ocultas

Os erros da MLP são demonstrados na Tabela 4.6.

Tabela 4.7 – Métricas de Previsão.

Erro	Valor
MAE	0.06430815
MAPE	0.1986635
RMSE	0.1156101

4.3 MLP com os menores erros

Para escolher o melhor modelo, comparamos os quatro melhores modelos: MLP com 7 variáveis (sem o silte), MLP com 5 variáveis (sem as frações de argila, silte e areia), MLP com 7 variáveis (sem a argila) e a MLP com todas as variáveis. A Tabela 4.7 compara os erros de cada modelo.

Tabela 4.8 – Comparaçāo dos erros

Erro	MLP7m(5,11)	MPL5(6,4)	MLP7c(6,1)	MLP(6,4)
MAE	0,06178453	0.1782465	0.06430815	0.162729
MAPE	0,3211416	0.3514599	0.1986635	0.5294337
RMSE	0,1250266	0.708868	0.115610	0.4414504

Desta forma, o melhor modelo é a MLP com sete variáveis e sem a fração de argila 4.6, pois possui o melhor valor de MAPE e RMSE e seu valor de MAE é o segundo melhor, sendo muito próximo do modelo sem o silte.

A figura 4.7 compara os valores reais com os valores calculados pelo modelo, demonstrando a eficiência do modelo.

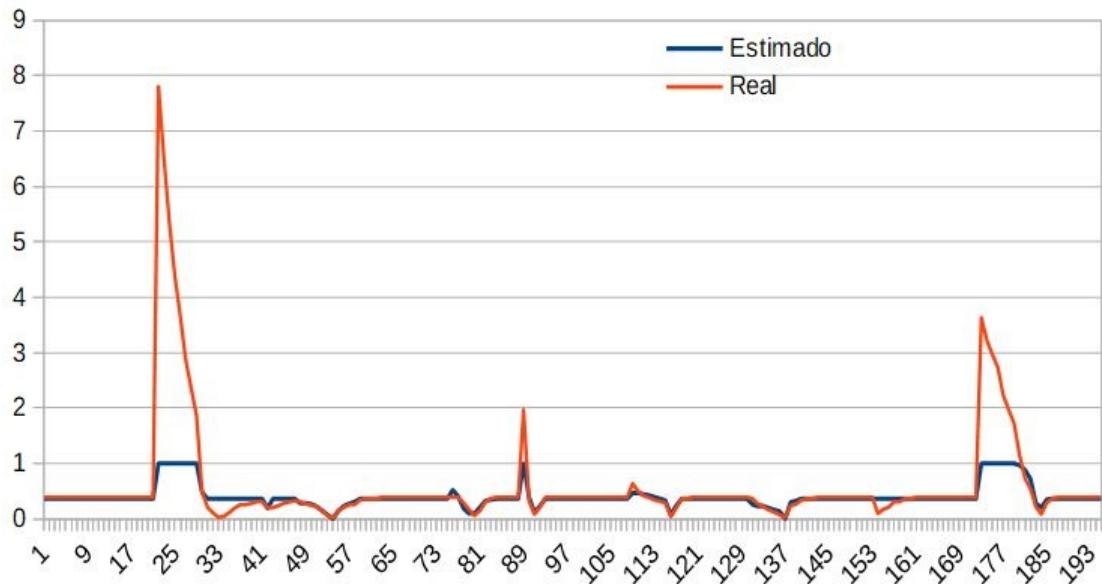


Figura 4.7 – Valores reais x valores estimados - modelo com 7 variáveis sem fração de argila

Conclusão

5.1 Conclusão

Uma MLP é uma ótima opção para a estimativa da permeabilidade hidráulica. Com seus recursos, métodos e praticidade, a MLP se mostra como uma alternativa muito interessante para os métodos numéricos tradicionais. Apesar de não demonstrar a forma de construção do modelo, especificando como ocorre sua construção, e de não ter uma regra específica para configurar o melhor modelo, as MLP retornam bons resultados para estimar variáveis. Seu uso exige cuidado e domínio do contexto, pois seus resultados podem ser divergentes da realidade. Para nosso banco de dados, a melhor configuração foi a MLP sem a variável fração de argila, com 6 na primeira camada e 1 neurônio na segunda.

5.2 Trabalhos futuros

Para sequência do trabalho, algumas ações podem complementar a pesquisa. Dentre os desafios que surgiram durante a pesquisa, algumas sugestões ficam como possíveis artigos ou complemento futuros.

O primeiro é fazer uma análise exploratória para verificar a configuração do banco de dados e excluir os *outlier* que possam estar influenciando os dados.

O segundo é utilizar o pacote *caret* para encontrar as melhores combinações de número de neurônios nas camadas ocultas. Com esse pacote também é possível fazer a validação cruzada, uma avaliação robusta e confiável de modelos, pois utilizando os dados de maneira mais eficiente, identifica modelos que podem estar superajustados (*overfitting*) aos dados de treinamento e diminui a variância na estimativa do desempenho do modelo.

O terceiro é encontrar outras formatações de MLP com menos variáveis, pois podem resultar em modelos mais simples e interpretação mais intuitiva.

Referências bibliográficas

- ALVES, M. F. *Funções de Ativação*. 2017. último acesso: 20 de Fevereiro de 2019. Disponível em: <<https://matheusfacure.github.io/2017/07/12/activ-func/>>.
- BRADY, N.; WEIL, R. *Elementos da natureza e propriedades dos solos*. Porto Alegre, PR: Bookman, 2013.
- BRAGA, T. B. L. . A. C. P. d. L. F. d. C. Antonio de P. *Redes neurais artificiais: teoria e aplicações*. Rio de Janeiro: LTC, 2000.
- FURTADO, M. I. V. *Redes neurais artificiais: uma abordagem para sala de aula*. Ponta Grossa, PR: Atena Editora, 2019.
- GERSCOVICH, D. M. S. *Fluxo em solos saturados*. 2011. Apostila do curso, UFC (Faculdade de Engenharia, Departamento de Estruturas e Fundações), Ceará, Brasil.
- GONÇALVES, A. R. *Redes Neurais Artificiais*. 2017. Apostila do curso, Unicamp (Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação da Universidade de Campinas, Brasil).
- HAYKIN, S. *Redes Neurais. Princípios e prática*. Porto Alegre, PR: Bookman, 2001.
- KOVÁCS, Z. L. *Redes neurais artificiais: fundamentos e aplicações*. São Paulo: Colleum Cognitio, 1996.
- LIER, Q. de Jong van. *Física do solo - baseada em processos*. Piracicaba, SP: Edição do autor, 2020.
- MACHADO, L. V. Z. S. L. Transporte de massa e mecanismos de retenção em solos não saturados. *5º SIMPÓSIO BRASILEIRO DE SOLOS NÃO SATURADOS*, v. 2, n. 5, p. 544–572, 2004.
- SILVA, J. P. de O. *Aplicação de redes neurais artificiais do tipo perceptron para previsão da condutividade hidráulica em solos não saturados*. Dissertação (Mestrado) — UFC, 2020.

Anexo I - O banco de dados

Exemplo	eo	wo	C	M	S	IP	ksat	ua-uw	kw
1	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	20	3,72E-09
2	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	25	2,71E-09
3	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	30	1,87E-09
4	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	35	1,62E-09
5	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	40	1,33E-09
6	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	45	1,18E-09
7	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	50	1,03E-09
8	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	55	7,81E-10
9	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	60	6,16E-10
10	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	65	5,4E-10
11	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	70	4,43E-10
12	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	75	3,93E-10
13	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	80	3,35E-10
14	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	85	3,06E-10
15	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	90	2,86E-10
16	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	95	2,64E-10
17	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	100	2,47E-10
18	0,93	14,7	27	16	57	15	0,0031	150	1,24E-10
19	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	25	1,54E-07
20	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	50	2,61E-08
21	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	75	9,85E-09
22	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	100	4,85E-09
23	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	125	3,02E-09
24	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	150	1,78E-09
25	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	175	1,17E-09
26	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	200	7,99E-10
27	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	225	6,39E-10
28	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	250	5,23E-10
29	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	275	4,19E-10

30	0,95	35	35	10	55	0	0,0035	300	3,28E-10
31	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	5	0,00139
32	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	10	0,00117
33	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	15	0,000973
34	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	20	0,00081
35	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	25	0,000687
36	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	30	0,000552
37	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	35	0,000466
38	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	40	0,00038
39	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	45	0,000319
40	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	50	0,000266
41	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	55	0,000219
42	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	60	0,00018
43	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	65	0,000147
44	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	70	0,000119
45	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	75	0,000101
46	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	80	8,44E-05
47	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	85	7,04E-05
48	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	90	5,88E-05
49	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	95	4,71E-05
50	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	100	3,55E-05
51	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	105	3,32E-05
52	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	110	3,09E-05
53	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	115	2,39E-05
54	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	120	2,15E-05
55	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	125	1,92E-05
56	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	130	1,69E-05
57	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	135	1,22E-05
58	1,19	22	9,5	27,5	63	0	0,0017	140	1,22E-05
59	0,39	16,13	27,58	21,42	50,25	9	3,77E-05	16,64	3,37E-05
60	0,39	16,13	27,58	21,42	50,25	9	3,77E-05	62,63	3,03E-05
61	0,39	16,13	27,58	21,42	50,25	9	3,77E-05	118,5	2,64E-05
62	0,39	16,13	27,58	21,42	50,25	9	3,77E-05	174,3	2,24E-05
63	0,39	16,13	27,58	21,42	50,25	9	3,77E-05	262,9	1,86E-05
64	0,39	16,13	27,58	21,42	50,25	9	3,77E-05	485	1,47E-05
65	0,39	16,13	27,58	21,42	50,25	9	3,77E-05	802,3	1,14E-05
66	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	0,1	0,000118
67	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	0,15	0,000118
68	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	0,27	0,000114
69	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	0,39	0,000112
70	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	0,61	0,00011
71	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	1	0,000108
72	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	2,02	0,000106
73	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	3,98	0,000104
74	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	9,11	9,17E-05
75	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	15,16	7,64E-05

76	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	21,61	6,31E-05
77	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	28,2	5,12E-05
78	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	35,98	4,11E-05
79	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	46,6	3,1E-05
80	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	52,83	2,53E-05
81	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	59,46	2,09E-05
82	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	85,39	1,01E-05
83	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	91,26	8,47E-06
84	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	96,82	6,99E-06
85	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	105,8	5,57E-06
86	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	113,9	4,16E-06
87	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	125,4	3,08E-06
88	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	131,1	2,54E-06
89	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	140,1	2,06E-06
90	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	163,6	9,92E-07
91	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	170,8	7,87E-07
92	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	181,2	6,1E-07
93	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	188,4	5,02E-07
94	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	194,1	3,94E-07
95	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	202,7	3,08E-07
96	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	209,9	2,51E-07
97	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	218,4	2,07E-07
98	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	240,9	1,04E-07
99	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	250,6	8,12E-08
100	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	260,6	6,3E-08
101	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	268,4	5E-08
102	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	276,4	4,07E-08
103	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	284,7	3,27E-08
104	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	293,2	2,59E-08
105	1,2	46	28	42	30	40	0,000118	299	2,06E-08
106	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	0,1	0,00014
107	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	0,2	0,00013
108	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	0,3	0,00013
109	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	0,4	0,00012
110	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	0,5	0,000115
111	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	0,6	9,44E-05
112	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	0,9	5,64E-05
113	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	1,2	4,11E-05
114	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	1,6	2,36E-05
115	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	2	1,53E-05
116	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	3	4,46E-06
117	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	4	1,21E-06
118	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	5	3,53E-07
119	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	6	8,82E-08
120	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	7	2,91E-08
121	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	8	7,26E-09
122	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	9	2,04E-09

123	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	10	5,74E-10
124	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	12	5,33E-11
125	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	14	4,21E-12
126	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	16	5E-13
127	0,9	12	26	11,5	62,5	13	0,00044	20	0
128	1,04	16	31	5	64	13	0,0046	0,2	0,0004
129	1,04	16	31	5	64	13	0,0046	0,9	0,00012
130	1,04	16	31	5	64	13	0,0046	1,4	5,22E-05
131	1,04	16	31	5	64	13	0,0046	1,7	3,09E-05
132	1,32	44,86	39	48	12	12,96	0,000177	10	9,68E-09
133	1,32	44,86	39	48	12	12,96	0,000177	12	4,39E-09
134	1,32	44,86	39	48	12	12,96	0,000177	14	2,47E-09
135	1,32	44,86	39	48	12	12,96	0,000177	16	1,6E-09
136	1,32	44,86	39	48	12	12,96	0,000177	18	9,33E-10
137	1,32	44,86	39	48	12	12,96	0,000177	20	6,51E-10
138	1,32	44,86	39	48	12	12,96	0,000177	25	2,65E-10
139	1,32	44,86	39	48	12	12,96	0,000177	30	1,39E-10
140	1,31	39,82	16	38	47	14,5	0,00138	10	1,75E-07
141	1,31	39,82	16	38	47	14,5	0,00138	12	1,08E-07
142	1,31	39,82	16	38	47	14,5	0,00138	16	5,02E-08
143	1,31	39,82	16	38	47	14,5	0,00138	18	3,58E-08
144	1,31	39,82	16	38	47	14,5	0,00138	20	2,55E-08
145	1,31	39,82	16	38	47	14,5	0,00138	25	1,47E-08
146	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	10	1,51E-07
147	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	14	5,99E-08
148	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	18	3,45E-08
149	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	22	1,92E-08
150	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	30	9,48E-09
151	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	39	5,45E-09
152	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	55	2,1E-09
153	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	76	7,85E-10
154	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	100	4,25E-10
155	0,92	22,34	52	10	39	21,55	0,00112	141	1,85E-10
156	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,01	0,000174
157	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,02	0,000151
158	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,03	0,000137
159	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,04	0,000131
160	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,06	0,000124
161	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,08	0,000119
162	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,1	0,000115
163	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,2	8,96E-05
164	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,3	7,24E-05
165	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,4	6,06E-05
166	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,6	4,9E-05
167	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	0,8	3,43E-05

168	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	1	2,87E-05
169	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	2	1,22E-05
170	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	3	5,59E-06
171	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	4	3,16E-06
172	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	6	1,35E-06
173	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	8	6,15E-07
174	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	10	4,01E-07
175	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	20	7,81E-08
176	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	30	2,99E-08
177	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	40	1,69E-08
178	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	60	7,46E-09
179	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	80	4,37E-09
180	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	100	3,41E-09
181	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	200	1,67E-09
182	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	300	1,21E-09
183	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	400	1,05E-09
184	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	600	6,87E-10
185	1,24	18,9	6	46	48	12	0,00023	800	3,89E-10
186	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,01	0,000142
187	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,02	0,000128
188	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,03	0,000111
189	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,04	0,000103
190	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,06	9,29E-05
191	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,08	8,65E-05
192	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,1	7,78E-05
193	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,2	6,28E-05
194	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,3	5,26E-05
195	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,4	4,25E-05
196	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,6	3,31E-05
197	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	0,8	2,67E-05
198	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	1	2,08E-05
199	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	2	9,19E-06
200	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	3	5,59E-06
201	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	4	3,39E-06
202	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	6	1,73E-06
203	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	8	9,43E-07
204	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	10	5,94E-07
205	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	20	1,54E-07
206	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	30	6,54E-08
207	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	40	3,83E-08
208	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	60	1,95E-08
209	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	80	1,23E-08
210	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	100	8,01E-09
211	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	200	3,66E-09
212	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	300	2,3E-09
213	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	400	1,67E-09
214	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	600	9,81E-10

215	1,14	25,6	5,5	30,5	64	15	0,00023	800	5,75E-10
216	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,01	5,07E-05
217	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,02	3,68E-05
218	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,03	3,08E-05
219	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,04	2,49E-05
220	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,06	1,87E-05
221	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,08	1,46E-05
222	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,1	1,18E-05
223	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,2	5,2E-06
224	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,3	2,84E-06
225	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,4	1,92E-06
226	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,6	8,78E-07
227	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	0,8	5,15E-07
228	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	1	3,36E-07
229	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	2	7,27E-08
230	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	3	3,1E-08
231	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	4	1,63E-08
232	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	6	6,24E-09
233	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	8	3,29E-09
234	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	10	2E-09
235	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	20	4,18E-10
236	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	30	1,78E-10
237	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	40	9,04E-11
238	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	60	3,99E-11
239	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	80	2,26E-11
240	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	100	1,47E-11
241	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	200	5,06E-12
242	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	300	3,08E-12
243	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	400	2,31E-12
244	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	600	1,68E-12
245	1,11	18,7	31	15,5	53,5	13	0,00026	800	1,51E-12
246	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,01	0,000682
247	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,02	0,000613
248	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,03	0,00057
249	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,04	0,000531
250	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,06	0,000445
251	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,08	0,0004
252	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,1	0,000359
253	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,2	0,000261
254	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,3	0,000189
255	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,4	0,000158
256	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,6	0,000103
257	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	0,8	7,5E-05
258	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	1	5,26E-05
259	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	2	1,74E-05

260	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	3	7,97E-06
261	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	4	4,68E-06
262	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	6	1,99E-06
263	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	8	9,77E-07
264	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	10	5,73E-07
265	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	20	1,33E-07
266	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	30	6,09E-08
267	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	40	3,57E-08
268	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	60	2,02E-08
269	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	80	1,37E-08
270	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	100	9,91E-09
271	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	200	4,22E-09
272	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	300	2,56E-09
273	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	400	1,56E-09
274	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	600	6,18E-10
275	1,41	20,6	10	40	50	4	0,0012	800	3,14E-10

Anexo II - O código do R

```
```{r, echo=TRUE, eval=TRUE}
library("factoextra")
library("tidyverse")
library("cluster")
library("biotools")
library("cluster")
library("mvnormtest")
library("psych")
library("MVN")
library("caret")
library("neuralnet")
library("readxl")
library("astsa")
library("normtest")
library("forecast")
library("fpp2")
library("nnfor")
library("dygraphs")
library("dplyr")
library("Metrics")
library("GGally")
library("htmltools")
```

```
%Etapa de importação da base de dados e de inspeção de
valores faltantes.

dadosdis <- data.frame(read.csv(file=file.choose(), head=T,
sep=";", dec = ","))
dadosdis

head(dadosdis)
dis <- data.frame(dadosdis[,2:10], row.names = dadosdis$Exemplo)
dis

disa <- scale(dis)
disa

Gráfico de caixas
boxplot(disa, col="violet")
boxplot(disa, col=rainbow(ncol(dis)),
 pch=16, ylim=c(-6.5, 6.5))
abline(h=c(-3,3), col="red", lty="dashed")
cor(dis)
plot(dis)

particao = createDataPartition(1:dim(disa)[1], p=.7)
dataset_treino = disa[particao$Resample1,]
dataset_teste = disa[-particao$Resample1,]
#dataset_teste <- as.data.frame(dataset_teste)
#dataset_treino <- as.data.frame(dataset_treino)
```

```

#MLP (5, 4)
```{r, echo=TRUE, eval=TRUE}
model01 <- neuralnet(kw ~ eo + wo + IP + ksat + C + M + S
+ ua.uw, dataset_treino, hidden = c(5, 4), threshold = 0.04,
stepmax = 1e+10, rep = 1, startweights = NULL,
learningrate.limit = NULL,
learningrate.factor = list(minus = 0.5, plus = 1.2),
learningrate = NULL, lifesign = "none",
lifesign.step = 1000, algorithm = "rprop+", 
err.fct = "sse", act.fct = "tanh",
inear.output = FALSE,
exclude = NULL,
constant.weights = NULL, likelihood = FALSE)

plot(model01, rep="best")
summary(model01)
print(model01)

dataset_teste <- as.data.frame(dataset_teste)
pred1 <- predict(model01, dataset_teste)
#head(dataset_teste)

test1 <- dataset_teste$kw

#Mean Absolute Error (mae)
mae(pred1, test1)

#mape Mean Absolute Percent Error
mape(pred1, test1)

#rmse Root Mean Squared Error
rmse(pred1, test1)
```

```

```

#MLP (6, 4)

```{r, echo=TRUE, eval=TRUE}
modelo2 <- neuralnet(kw ~ eo + wo + IP + ksat + C + M + S
+ ua.uw, dataset_treino, hidden = c(6,4), threshold = 0.04,
stepmax = 1e+10, rep = 1, startweights = NULL,
learningrate.limit = NULL,
learningrate.factor = list(minus = 0.5,plus = 1.2),
learningrate = NULL, lifesign = "none",
lifesign.step = 1000, algorithm = "rprop+", err.fct = "sse",
act.fct = "tanh", linear.output = FALSE, exclude = NULL,
constant.weights = NULL, likelihood = FALSE)
modelo2
```

```{r, echo=TRUE, eval=TRUE}
plot(modelo2, rep="best")
summary(modelo2)
```

```{r, echo=TRUE, eval=TRUE}
pred2 <- predict(modelo2, dataset_teste)
#head(dataset_teste)

test2 <- dataset_teste$kw
  #Mean Absolute Error (mae)
mae(pred2,test2)

#mape Mean Absolute Percent Error
mape(pred2,test2)

#rmse Root Mean Squared Error
rmse(pred2,test2)
pred2
test2

```

```

#MLP7m(511)

```{r, echo=TRUE, eval=TRUE}
modelo7m511 <- neuralnet(kw ~ eo + wo + IP + ksat + C + S
+ ua.uw, dataset_treino, hidden = c(5,11),
threshold = 0.04, stepmax = 1e+10, rep = 1,
startweights = NULL, learningrate.limit = NULL,
learningrate.factor = list(minus = 0.5,plus = 1.2),
learningrate = NULL, lifesign = "none",
lifesign.step = 1000, algorithm = "rprop+",
err.fct = "sse", act.fct = "tanh",
linear.output = FALSE, exclude = NULL,
constant.weights = NULL, likelihood = FALSE)
```

```{r, echo=TRUE, eval=TRUE}
#dataset_teste <- as.data.frame(dataset_teste)
plot(modelo7m511, rep="best")
summary(modelo7m511)

pred7m511 <- predict(modelo7m511, dataset_teste)
#head(dataset_teste)

test7m511<- dataset_teste$kw

#Mean Absolute Error (mae)
mae(pred7m511,test7m511)

#mape Mean Absolute Percent Error
mape(pred7m511,test7m511)

#rmse Root Mean Squared Error
rmse(pred7m511,test7m511)
```

```

```

#MLP5(6,4)

``{r, echo=TRUE, eval=TRUE}
modelo5.64 <- neuralnet(kw ~ eo + wo + IP + ksat + ua.uw,
dataset_treino, hidden = c(6,4), threshold = 0.04,
stepmax = 1e+10, rep = 1,
startweights = NULL, learningrate.limit = NULL,
learningrate.factor = list(minus = 0.5, plus = 1.2),
learningrate = NULL, lifesign = "none",
lifesign.step = 1000, algorithm = "rprop+",
err.fct = "sse", act.fct = "tanh", linear.output = FALSE,
exclude = NULL, constant.weights = NULL, likelihood = FALSE)

plot(modelo5.64, rep="best")
summary(modelo5.64)

pred5.64 <- predict(modelo5.64, dataset_teste)
#head(dataset_teste)

test5.64 <- dataset_teste$kw

  #Mean Absolute Error (mae)
mae(pred5.64,test5.64)

#mape Mean Absolute Percent Error
mape(pred5.64,test5.64)

#rmse Root Mean Squared Error
rmse(pred5.64,test5.64)
```

```

```

#MLP7c(6,3)

```{r, echo=TRUE, eval=TRUE}
modelo7c63 <- neuralnet(kw ~ eo + wo + IP + ksat + M + S
+ ua.uw, dataset_treino, hidden = c(6,3),
threshold = 0.04, stepmax = 1e+10, rep = 1,
startweights = NULL, learningrate.limit = NULL,
learningrate.factor = list(minus = 0.5,plus = 1.2),
learningrate = NULL, lifesign = "none",
lifesign.step = 1000, algorithm = "rprop+", 
err.fct = "sse", act.fct = "tanh",
linear.output = FALSE, exclude = NULL,
constant.weights = NULL, likelihood = FALSE)

plot(modelo7c63, rep="best")
summary(modelo7c63)

pred7c63 <- predict(modelo7c63, dataset_teste)
#head(dataset_teste)

test7c63<- dataset_teste$kw

#Mean Absolute Error (mae)
mae(pred7c63,test7c63)

#mape Mean Absolute Percent Error
mape(pred7c63,test7c63)

#rmse Root Mean Squared Error
rmse(pred7c63,test7c63)
```

```