## UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO CENTRO TECNOLÓGICO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL

LUCAS BROSEGHINI TOTOLA

## APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS NA ESTIMATIVA DE CURVAS DE RETENÇÃO DE SOLOS BRASILEIROS

VITÓRIA – ES 2020

### LUCAS BROSEGHINI TOTOLA

## APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS NA ESTIMATIVA DE CURVAS DE RETENÇÃO DE SOLOS BRASILEIROS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil, na área de concentração Estruturas/Geotecnia e Fundações.

Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Kátia Vanessa Bicalho Co-Orientador: Prof. Dr. Wilian Hiroshi Hisatugu

Ficha catalográfica disponibilizada pelo Sistema Integrado de Bibliotecas - SIBI/UFES e elaborada pelo autor

Totola, Lucas Broseghini, 1993-

T717a

Aplicação de redes neurais artificiais na estimativa de curvas de retenção de solos brasileiros / Lucas Broseghini Totola. - 2020. 124 f. : il.

Orientadora: Kátia Vanessa Bicalho. Coorientador: Wilian Hiroshi Hisatugu. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) - Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Solos - Potencial matricial. 2. Solos - Umidade. 3. Redes neurais (Computação). 4. Engenharia geotécnica. 5. Inteligência artificial. I. Bicalho, Kátia Vanessa. II. Hisatugu, Wilian Hiroshi. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV. Título.

CDU: 624

### LUCAS BROSEGHINI TOTOLA

### APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS NA ESTIMATIVA DE CURVAS DE RETENÇÃO DE SOLOS BRASILEIROS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil, na área de concentração Estruturas/Geotecnia e Fundações.

### **COMISSÃO EXAMINADORA:**

Profa. Dra. Kátia Vanessa Bicalho Universidade Federal do Espírito Santo Orientadora

Prof. Dr. Wilian Hiroshi Hisatugu Universidade Federal do Espírito Santo Co-orientador

Prof. Dr. Élcio Cassimiro Alves Universidade Federal do Espírito Santo Examinador Interno

Prof. Dr. Bruno Teixeira Dantas Universidade Federal do Espírito Santo Examinador Externo

Prof. Dr. Waldyr Lopes de Oliveira Universidade Federal de Ouro Preto Examinador Externo

Profa. Dra. Márcia Maria dos Anjos Mascarenha Universidade Federal de Goiás Examinadora Externa

### AGRADECIMENTOS

Aos professores e orientadores Kátia Vanessa Bicalho e Wilian Hiroshi Hisatugu, pelo incentivo, colaboração, dedicação e amizade durante os dois anos de mestrado.

Aos professores Élcio Alves, Márcia Maria dos Anjos Mascarenha, Bruno Teixeira Dantas e Waldyr Lopes de Oliveira Filho por aceitarem compor a banca examinadora e contribuir para o aperfeiçoamento deste trabalho.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil – PPGEC da Universidade Federal do Espírito Santo (UFES) pela oportunidade. Aos professores, funcionários e colegas de curso, pela participação e contribuição ao longo desses dois anos.

A todos meus amigos e familiares que me deram a confiança e o suporte necessários para não desistir em nenhum momento.

À CAPES e a UFES pelo apoio financeiro.

#### RESUMO

A relação constitutiva entre o teor de umidade ou grau de saturação e a sucção é denominada curva de retenção de água no solo (CRAS). O conhecimento da CRAS é importante para o estudo da mecânica dos solos não saturados e para a prática da engenharia geotécnica. Como a CRAS pode apresentar variabilidade espacial e temporal, a sua determinação direta pode ser demorada e custosa. Dessa forma, o conceito de funções de pedotransferência (PTFs), que utiliza propriedades de simples obtenção para estimativa da CRAS, tem sido amplamente utilizado. A partir de um extenso banco de dados hidrofisicos experimentais de solos de ambiente tropical e subtropical brasileiros, composto em sua maioria por Planossolos, Latossolos e Argissolos, este estudo objetiva avaliar o desempenho do uso de redes neurais artificiais (RNAs) para estimativa CRAS limite superior de secagem para a faixa de sucção de 0 a 1500 kPa. Duas diferentes topologias (pontual e pseudocontínua) são propostas, e fatores que influenciam a capacidade de previsão das RNAs são analisados, como a estrutura e a geometria das redes, e a adição de parâmetros de entrada em uma estrutura hierárquica. Os parâmetros de entrada incluem propriedades físicas como a distribuição granulométrica, a densidade do solo e dos sólidos, a porosidade total e o teor de matéria orgânica. O desempenho geral foi caracterizado pelo coeficiente de determinação (r<sup>2</sup>) e pela raiz do erro quadrático médio (RMSE). As análises e resultados obtidos evidenciam a influência da escolha adequada dos parâmetros de entrada, que deve incluir propriedades representativas da textura e da estrutura do solo para explicar o comportamento hidráulico do solo ao longo de toda a CRAS, gerando assim, melhores resultados. A topologia pseudocontínua superou o desempenho da topologia pontual e os valores de RMSE diminuíram de 0.048 para 0.029 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> quando mais preditores foram utilizados. Como as partículas do tamanho da argila são predominantes nos finos para solos tropicais, o uso da mineralogia da argila é recomendado para minimização dos erros das estimativas no trecho seco da CRAS. Embora a realização de ensaios seja indispensável, e considerando a limitação geográfica de PTFs para solos brasileiros existentes na literatura, os resultados indicam as RNAs como uma ferramenta potencial para estimativa da CRAS limite superior de secagem ao longo de um amplo intervalo de sucção, sendo útil para estudos e projetos preliminares em solos não saturados.

Palavras-chave: curva de retenção, redes neurais artificiais, solos não saturados, solos tropicais.

### ABSTRACT

The constitutive relationship between water content or degree of saturation and suction is determined soil-water retention curve (SWRC). The understand of the SWRC is important in the unsaturated soil mechanics study and in solving geotechnical engineering practical problems. As the SWRC presents spatial and variability, its direct determination can be time-consuming and costly. Thus, the pedotransfer function concept (PTF), which use easily obtainable properties to indirectly estimate the SWRC, have gained prominence. Based on an extensive hydrophysical database of Brazilian tropical and subtropical soils, mostly composed by Planosols, Ferralsols and Acrisols, this study aims to evaluate the use of artificial neural networks (ANNs) to estimate the drying limit SWRC for the range of matric potentials from 0 to 1500 kPa. Two different topologies (point and pseudo-continuous) are proposed, and factors influencing ANNs performance are analyzed, such as the networks structure and geometry, and the addition of input parameters in a hierarchical structure. Physical parameters such as particle size distribution, bulk and particle density, total porosity and organic matter content are used as input parameters for the ANNs. The overall performance was characterized by the coefficient of determination  $(r^2)$  and the root mean square error (RMSE). The analyzes and results obtained show the importance of the appropriate choice of input parameters, which must include properties representative of both soil texture and structure to represent the hydraulic behavior of the soil along the entire curve, thus providing better results. The pseudo-continuous topology overcome the point topology performance and the RMSE values decreased from 0.048 to 0.029 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> when more predictors were used. As particles of clay size are predominant in fines for tropical soils, the use of clay mineralogy is recommended to minimize errors in estimates in the SWRC dry end. Although experimental testing remains essential, and considering the geographic limitation of *PTFs* for Brazilian soils in the literature, the results indicate the ANNs as a potential tool for predicting the upper limit drying SWRC over a wide suction interval, being useful for preliminary studies and projects on unsaturated soils.

Keywords: soil-water retention curve, artificial neural networks, unsaturated soils, tropical soils.

### LISTA DE FIGURAS

Figura I – Tipica curva de retenção de agua no solo (CRAS)
Figura 2 – Formato típico de curvas de retenção para areias com diferentes granulometrias $26$
Figura 3 – Influência do histórico de tensões e do método de preparação da amostra na CRAS 28
Figura 4 – Influência da estrutura do solo pela variação do teor de umidade inicial na CRAS 28
Figura 5 – Partes constituintes do neurônio biológico
Figura 6 – Modelo Não-Linear de Neurônio Artificial $3\epsilon$
Figura 7 – Classificação das arquiteturas de redes <i>feed-forward</i> e redes recorrentes
Figura 8 – Arquitetura de um Perceptron de múltiplas camadas com duas camadas ocultas 40
Figura 9 – Etapas no desenvolvimento de uma RNA $4\epsilon$
Figura 10 – Representação do problema do overfitting 49
Figura 11 – Topologias típicas de <i>RNAs</i> para previsão da <i>CRAS</i> : (a) modelo pontual, (b) modelo
paramétrico para estimativa dos parâmetros da equação de van Genuchten (1980) e (c) modelo
pseudocontínuo
Figura 12 – Localização geográfica das 565 amostras de solo do HYBRAS investigadas
Figura 13 – Classificação textural e distribuição das 565 amostras investigadas do HYBRAS no
triângulo textural 64
Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) % argila, (b)
Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b) %silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade
Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b) %silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade total, (g) Teor de Matéria Orgânica
<ul> <li>Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)</li> <li>%silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade</li> <li>total, (g) Teor de Matéria Orgânica.</li> <li>Figura 15 – Pares experimentais (θ,h) para cada classe textural.</li> </ul>
<ul> <li>Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)</li> <li>%silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade</li> <li>total, (g) Teor de Matéria Orgânica.</li> <li>65</li> <li>Figura 15 – Pares experimentais (θ,h) para cada classe textural</li> <li>67</li> <li>Figura 16 – Telas da interface nftool após o treinamento de uma RNA</li> </ul>
<ul> <li>Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)</li> <li>%silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade total, (g) Teor de Matéria Orgânica.</li> <li>65</li> <li>Figura 15 – Pares experimentais (θ,h) para cada classe textural</li></ul>
<ul> <li>Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)</li> <li>%silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade total, (g) Teor de Matéria Orgânica.</li> <li>65</li> <li>Figura 15 – Pares experimentais (θ,h) para cada classe textural</li> <li>67</li> <li>Figura 16 – Telas da interface nftool após o treinamento de uma RNA</li> <li>69</li> <li>Figura 17 – Modelos de <i>RNAs</i> propostos: (a) modelo pontual (PT-RNA) e (b) modelo</li> <li>pseudocontínuo (PC-RNA)</li> <li>71</li> </ul>
<ul> <li>Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)</li> <li>%silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade total, (g) Teor de Matéria Orgânica.</li> <li>65</li> <li>Figura 15 – Pares experimentais (θ,h) para cada classe textural</li> <li>67</li> <li>Figura 16 – Telas da interface nftool após o treinamento de uma RNA</li> <li>69</li> <li>Figura 17 – Modelos de <i>RNAs</i> propostos: (a) modelo pontual (PT-RNA) e (b) modelo pseudocontínuo (PC-RNA)</li> <li>71</li> <li>Figura 18 – Pares de pontos medidos (θ, h) para as 565 amostras de solo investigadas</li> <li>72</li> </ul>
<ul> <li>Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)</li> <li>%silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade</li> <li>total, (g) Teor de Matéria Orgânica</li></ul>
<ul> <li>Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)</li> <li>%silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade total, (g) Teor de Matéria Orgânica.</li> <li>Figura 15 – Pares experimentais (θ,h) para cada classe textural</li></ul>
Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)         %silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade         total, (g) Teor de Matéria Orgânica.       65         Figura 15 – Pares experimentais (θ,h) para cada classe textural       67         Figura 16 – Telas da interface nftool após o treinamento de uma RNA       69         Figura 17 – Modelos de <i>RNAs</i> propostos: (a) modelo pontual (PT-RNA) e (b) modelo       71         Figura 18 – Pares de pontos medidos (θ, h) para as 565 amostras de solo investigadas       72         Figura 19 – Desempenho do modelo <i>xiv</i> para diferentes proporções de dados entre os conjuntos       78         Figura 20 – Desempenho do modelo <i>xiv</i> para diferentes proporções de dados entre os conjuntos       78
Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)         %silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade         total, (g) Teor de Matéria Orgânica.       65         Figura 15 – Pares experimentais (θ,h) para cada classe textural       67         Figura 16 – Telas da interface nftool após o treinamento de uma RNA       69         Figura 17 – Modelos de <i>RNAs</i> propostos: (a) modelo pontual (PT-RNA) e (b) modelo       71         Figura 18 – Pares de pontos medidos (θ, h) para as 565 amostras de solo investigadas       72         Figura 19 – Desempenho do modelo <i>xiv</i> para diferentes proporções de dados entre os conjuntos       78         (a) Total (b) Treinamento e (c) Teste       78         Figura 20 – Desempenho do modelo <i>xiv</i> para diferentes proporções de dados entre os conjuntos       78         (a) Total (b) Treinamento e (c) Teste       78         Figura 20 – Desempenho do modelo <i>xiv</i> para diferentes proporções de dados entre os conjuntos       78         (a) Total (b) Treinamento e (c) Teste       78         Figura 20 – Desempenho do modelo <i>xiv</i> para diferentes proporções de dados entre os conjuntos       78         (a) Total (b) Treinamento e (c) Teste       78
Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b)         %silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade         total, (g) Teor de Matéria Orgânica.       65         Figura 15 – Pares experimentais (θ,h) para cada classe textural       67         Figura 16 – Telas da interface nftool após o treinamento de uma RNA       69         Figura 17 – Modelos de <i>RNAs</i> propostos: (a) modelo pontual (PT-RNA) e (b) modelo       71         Figura 18 – Pares de pontos medidos (θ, h) para as 565 amostras de solo investigadas       72         Figura 19 – Desempenho do modelo <i>xiv</i> para diferentes proporções de dados entre os conjuntos       78         Figura 20 – Desempenho do modelo <i>xiv</i> para diferentes proporções de dados entre os conjuntos       78         Figura 21 – Desempenho de <i>PT-RNAs</i> com 3 ou 4 parâmetros de entrada para (a) o conjunto de       78

Figura 22 – Desempenho de <i>PT-RNAs</i> com 4 ou 5 parâmetros de entrada para (a) o conjunto de
treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)
Figura 23 – Desempenho de PT-RNAs com 5, 6 ou 7 parâmetros de entrada para (a) o conjunto de
treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)
Figura 24 – Variação do <i>RMSE</i> com o número de pesos sinápticos para as <i>PT-RNAs</i> para o (a)
conjunto de treinamento e (b) conjunto de testes
Figura 25 – Variação do <i>RMSE</i> do modelo <i>xiv</i> (PT-RNA) com 1, 2 e 3 camadas escondidas: (a)
conjunto de treinamento (b) conjunto de teste
Figura 26 – Comparação entre $\theta_{lab}$ e $\theta_{est}$ para modelos de <i>PT-RNAs</i> (a) SSC (b) SSC, BD, (c)
SSC, BD, PD, (d) SSC, BD, PD, n e (e) SSC, BD, PD, n, MO
Figura 27 – Desempenho de PC-RNAs com 4 ou 5 parâmetros de entrada para (a) o conjunto de
treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)
Figura 28 – Desempenho de PC-RNAs com 5, 6 ou 7 parâmetros de entrada para (a) o conjunto
de treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)
Figura 29 – Desempenho de PC-RNAs com 6, 7 ou 8 parâmetros de entrada para (a) o conjunto
de treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)
Figura 30 – Variação do <i>RMSE</i> com o número de pesos sinápticos para as <i>PC-RNAs</i> para o (a)
conjunto de treinamento e (b) conjunto de teste
Figura 31 – Variação do <i>RMSE</i> do modelo <i>xiv</i> (PC-RNA) com 1, 2 e 3 camadas escondidas: (a)
conjunto de treinamento (b) conjunto de teste
Figura 32 – Comparação entre $\theta_{lab} e \theta_{est}$ para as PC-RNAs: (a) SSC e ln(h), (b) SSC, BD e ln(h),
(c) SSC, BD, PD e ln(h), (d) SSC, BD, PD, n e ln(h) e (e) SSC, BD, PD, n, MO e ln(h) 100
Figura 33 – <i>RMSE</i> médio para <i>PT-RNAs</i> e <i>PC-RNAs</i> em relação à classe textural do solo 107
Figura 34 – CRAS limite superior de secagem estimadas pelas RNAs desenvolvidas neste estudo
para amostras de solo do HYBRAS 109

### LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Intervalo de sucção para algumas técnicas de medição	. 29
Tabela 2 – Equações propostas na literatura para representação analítica da CRAS	. 30
Tabela 3 – Tipos de funções de ativação	. 37
Tabela 4 – Parâmetros de entrada comumente utilizados para as RNAs da literatura para	
estimativa da CRAS	. 56
Tabela 5 – Domínio geográfico e características de solos utilizados para o desenvolvimento de	<b>)</b>
RNAs na estimativa da CRAS	. 57
Tabela 6 – Características inerentes a metodologia das RNAs da literatura para estimativa da	
CRAS	. 58
Tabela 7 – Resumo estatístico das características hidrofísicas dos solos investigados	. 65
Tabela 8 – Valores médios de dados hidrofísicos do HYBRAS para várias classes texturais	. 66
Tabela 9 – Características das <i>RNAs</i> modeladas	. 73
Tabela 10 – Avaliação da correlação entre as variáveis de entrada investigadas	. 75
Tabela 11 – Matriz de correlação entre as propriedades de entrada e saída	. 75
Tabela 12 – Diferentes combinações de parâmetros de entrada para os modelos investigados	. 77
Tabela 13 – Desempenho estatístico das PT-RNAs para o conjunto global	. 80
Tabela 14 – Desempenho estatístico das PT-RNAs para o conjunto de teste	. 81
Tabela 15 – Variação do RMSE para PT-RNAs para diferentes estudos	. 85
Tabela 16 – Variação do RMSE para os modelos com 2 camadas escondidas (conjunto global e	e de
teste)	. 87
Tabela 17 – Variação do RMSE para os modelos com 3 camadas escondidas (conjunto global e	e de
teste)	. 87
Tabela 18 – Variação do RMSE e resumo estatístico das PC-RNAs para o conjunto global	. 92
Tabela 19 – Variação do RMSE e resumo estatístico das PC-RNAs para o conjunto de teste	. 93
Tabela 20 – Variação do RMSE para as PC-RNAs de diferentes estudos	. 97
Tabela 21 – Variação do RMSE para as PC-RNAs com 2 camadas escondidas (conjuntos globa	ıl e
de teste)	. 98
Tabela 22 – Variação do RMSE para as PC-RNAs com 3 camadas escondidas (conjuntos globa	ıl e
de teste)	. 98

Tabela 23 – Desempenho da geometria ótima de cada modelo de <i>PT-RNA</i> e <i>PC-RNA</i> para os	
conjuntos global e de teste	101
Tabela 24 – RMSE médio para as PT-RNAs treinadas com relação a diferentes sucções (h)	103
Tabela 25 – RMSE médio para as PC-RNAs treinadas com relação a diferentes sucções (h)	104
Tabela 26 – RMSE médio para as PT-RNAs treinadas com relação à classe textural do solo	105
Tabela 27 – RMSE médio para as PC-RNAs treinadas com relação à classe textural do solo 1	107

### SÍMBOLOS E SIGLAS

AEV	Valor de entrada de ar		
$a_{fx}$ , $n_{fx}$ e $m_{fx}$	Parâmetros de ajuste da Equação de Fredlund e Xing (1994)		
ag e ng	Parâmetros de ajuste da Equação de Gardner (1958)		
AIC	Critério de Informação de Akaike		
ANN	Artificial Neural Networks		
ART Teoria de ressonância adaptativa			
BD	Densidade aparente seca do solo (g.cm <sup>-3</sup> )		
b <sub>k</sub>	Bias do neurônio artificial		
СО	Teor de carbono orgânico (%)		
CRAS	Curva de Retenção de Água no Solo		
CPRM	Companhia de Pesquisa de Recursos Minerais		
C(h)	Fator de correção da equação de Fredlund e Xing (1994)		
dg	Média do diâmetro das partículas do solo		
E	Número de parâmetros de entrada		
$e_i^t$	Erro da RNA na iteração t		
<i>f</i> (.)	Função de Ativação do neurônio artificial		
g	Aceleração da gravidade		
GMER	Erro geométrico médio		
h	Sucção (kPa)		
Н	Matriz Hessiana		
h <sub>b</sub>	Sucção correspondente a AEV		
h <sub>r</sub>	Sucção correspondente a $\theta_r$		
HYBRAS	Hydrophysical Database for Brazilian Soils		
HYPRES	Hydraulic Properties of European Soils		
Ι	Matriz identidade		
J	Matriz Jacobiana		
kNN	k-Nearest neighbord		
K <sub>sat</sub>	Condutividade hidráulica saturada (cm.d <sup>-1</sup> )		
LM	Algoritmo de Levenberg-Marquardt		
ln(h)	Logaritmo natural da sucção		

logsig	Função logística
MAE	Erro absoluto médio
МСР	Modelo de neurônio de McCulloch e Pitts
MLP	Perceptron multicamadas
MO	Teor de matéria orgânica (%)
MSE	Erro quadrático médio
n	Porosidade total do solo
na	Número de amostras de solo
Ν	Número de exemplos apresentados a um modelo
Ne	Número de neurônios na camada escondida da RNA
n <sub>psd</sub>	Uniformidade da curva granulométrica
Р	Número total de pesos sinápticos de um modelo
PC-RNAs	Redes neurais artificiais pseudocontínuas
PD	Densidade dos sólidos (g.cm <sup>-3</sup> )
PSD	Pontos da curva granulométrica
PT-RNAs	Redes neurais artificiais pontuais
PTFs	Funções de pedotransferência
r	Coeficiente de correlação de Pearson
r <sup>2</sup>	Coeficiente de determinação
RMSE	Raiz do erro quadrático médio
RNAs	Redes neurais artificiais
S	carga de pressão (cm)
S	Grau de saturação (%)
SVM	Máquina de vetores de suporte
SWRC	Soil Water Retention Curve
t	i-ésima iteração
tanh	Tangente hiperbólica
tansig	Tangente sigmoide
ua	Poropressão do ar
uw	Poropressão da água
u <sub>k</sub>	Combinação linear de saída de um neurônio artificial

UFRJ	Universidade Federal do Rio de Janeiro
UNSODA	Unsaturated Soil Hydraulic Database
USDA	United States Department of Agriculture
Vw	Volume de água
W	Umidade gravimétrica do solo
Wi	Pesos sinápticos de um neurônio artificial
w	Vetor de pesos sinápticos ajustáveis
Ww	Peso de água
Xi	Terminal de entrada do neurônio artificial
Х	Matriz de entradas
Уĸ	Terminal de saída do neurônio artificial
Y	Matriz de saídas esperadas
Ŷ	Vetor de saídas estimadas pela RNA
Z	Número de parâmetros de saída
μ	Parâmetro ajustável do algoritmo Levenberg-Marquardt
$\alpha$ , $\theta$ s $n_{vg}$ e $m_{vg}$	Parâmetros de ajuste da Equação de Van Genuchten (1980)
η	Taxa de aprendizado do algoritmo de back-propagation
Θ	Teor de umidade normalizado
θ	Umidade volumétrica (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )
$\theta_h$	Umidade volumétrica associada a uma sucção h (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )
$\theta_{i,lab} \ e \ \theta_{i,est}$	Umidade volumétrica medida e estimada, respectivamente
θr	Umidade volumétrica residual (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )
$\theta_{sat}$	Umidade volumétrica saturada (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )
$\overline{\theta_{lab}}$ e $\overline{\theta_{est}}$	Média das umidades volumétricas observadas e calculadas, respectivamente
λ	Índice de distribuição de tamanho dos poros
σ <sub>g</sub>	Desvio padrão do diâmetro das partículas do solo
Ψad	Parcela do potencial mátrico referente à adsorção
Ψcp	Parcela do potencial mátrico referente à capilaridade
Ψg	Potencial gravitacional
Ψm	Potencial mátrico
ψο	Potencial osmótico

$\psi_t$	Potencial total de água no solo
%G	Porcentagem de partículas de tamanho pedregulho
%SSC	Porcentagens de partículas de tamanho areia, silte e argila

# Sumário

AGR	ADEC	IMENTOS	3
RESU	J <b>MO</b>		4
ABST	<b>RAC</b>	Γ	5
LIST	A DE I	FIGURAS	6
LIST	A DE '	TABELAS	8
SÍME	SOLOS	S E SIGLAS	10
1. I	NTRO	DUÇÃO	16
1.1	Objeti	ivos	
1.2	Organ	ização da Dissertação	19
2. 0	CURVA	A DE RETENÇÃO DE ÁGUA NO SOLO ( <i>CRAS</i> )	20
2.1	Sucçã	o do Solo	20
2.2	Forma	ato e Parâmetros da Curva de Retenção de Água no Solo (CRAS)	22
2.3	Fatore	es de Influência na CRAS	25
2.4	Métoc	los Diretos para Estimativa da CRAS	
2.5	Métoc	los Indiretos – Funções de Pedotransferência	
2	5.1	Estimativa Indireta da CRAS de Solos Brasileiros	
2.6	Redes	Neurais Artificiais (RNAs)	
2	6.1	Arquitetura das Redes Neurais Artificiais (RNAs)	
2	6.2	Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP)	
2	6.3	Paradigmas de Aprendizagem	41
2	6.4	Algoritmo de aprendizado back-propagation	
2	6.5	Desenvolvimento de PTFs do tipo RNA	
2.7	Utiliza	ação de RNAs na Estimativa da CRAS - Trabalhos Anteriores	

3.	N	ATE	RIAIS E MÉTODOS	60
	3.1	Banco	o de Dados HYBRAS (OTTONI et al., 2018, 2019)	60
	3	.1.1	Descrição dos Dados Investigados	61
	3.2	Ferrai	nenta Computacional	68
	3.3	Mode	los Propostos	70
4.	A	NÁLI	SE DOS RESULTADOS	74
	4.1	Análi	se Exploratória dos Dados	74
	4.2	Influê	ncia da Proporção de Dados nos Conjuntos de Treinamento, Validação e Teste	77
	4.3	Mode	lo Pontual (PT-RNAs)	79
	4	.3.1	Influência dos Parâmetros de Entrada e do Número de Neurônios na Camada Escondida	79
	4	.3.2	Influência do Número de Camadas Escondidas	87
	4	.3.3	Estrutura Hierárquica	
	4.4	Mode	lo Pseudocontínuo (PC-RNAs)	91
	4	.4.1	Influência dos Parâmetros de Entrada e do Número de Neurônios na Camada Escondida	91
	4	.4.2	Influência do Número de Camadas Escondidas	97
	4	.4.3	Estrutura Hierárquica	99
	4.5	Comp	paração entre as PT-RNAs e PC-RNAs	101
	4	.5.1	Desempenho dos Conjuntos Global e de Teste	101
	4	.5.2	Desempenho para diferentes trechos da CRAS	102
	4	.5.3	Desempenho por Classe Textural	105
	4.6	Comp	oortamento de CRAS Limite Superior de Secagem Estimadas	108
5.	0	CONC	LUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	110
	5.1	Concl	usões	111
	5.2	Suges	tões para Trabalhos Futuros	114
RI	EFI	ERÊN	CIAS	115
Al	NE	XOS		123

## 1. INTRODUÇÃO

Projetos de pavimentação, estabilização de taludes, barragens de terra, fundações e aterros de resíduos são exemplos de obras de engenharia relacionadas à condição de não saturação do solo. A curva de retenção de água no solo (*CRAS*), que se refere à relação gráfica entre a sucção e o teor de umidade no solo, apresenta papel crucial no desenvolvimento da teoria e na aplicação da Mecânica dos Solos não saturados (FREDLUND; RAHARDJO; FREDLUND, 2012). Diversas pesquisas utilizam a capacidade de retenção de água no solo, denominada neste trabalho como curva de retenção, como informação fundamental para modelagem do comportamento hidráulico dos solos não saturados em temas como permeabilidade, infiltração, resistência ao cisalhamento, fluxo e alteração de volume (BARBOUR, 1998; FREDLUND, 2006).

A função utilizada para definir a *CRAS*, geralmente, apresenta natureza não linear e é influenciada por diversos fatores, tais como o tipo de solo, a estrutura, o estado inicial da amostra e o estado de tensão (MASROURI; BICALHO; KAWAY, 2008; PHAM *et al.*, 2019). A determinação direta da *CRAS* está associada a ensaios geralmente complexos, demorados e custosos (LU; LIKOS, 2004; FREDLUND; RAHARDJO; FREDLUND, 2012). Assim, consideráveis esforços têm sido aplicados no desenvolvimento de métodos indiretos de estimativa da *CRAS* e, consequentemente, nas propriedades dos solos não saturados associadas a *CRAS*.

Nos últimos anos, ganhou destaque o desenvolvimento de funções de pedotransferência (*pedotransfer functions*, PTFs), conceito originalmente proposto por Bouma (1989). As *PTFs* oferecem uma relação empírica entre propriedades do solo de fácil obtenção, rotineiras e de menor custo, e propriedades hidráulicas do solo, por exemplo (CHIN; LEONG; RAHARDJO, 2010; OTTONI, 2017). A distribuição granulométrica, a densidade do solo e o teor de matéria orgânica são exemplos de propriedades usualmente disponíveis e utilizadas na estimativa indireta da *CRAS* (RAWLS; GISH; BRAKENZIEK, 1991).

Existem dois grupos principais em relação a metodologia de desenvolvimento de *PTFs* para estimativa da *CRAS*: (a) abordagem físico-empírica e (b) abordagem estatística. Os modelos semiempíricos utilizam algum princípio ou mecanismo físico na criação de modelos. Arya e Paris (1981) e Haverkamp e Parlange (1986), por exemplo, utilizam a similaridade entre a curva de distribuição granulométrica e a distribuição dos poros do solo na estimativa da *CRAS*. No segundo grupo estão os métodos empíricos, em que são estabelecidas relações entre as variáveis preditoras e preditas por meio de técnicas estatísticas, como as regressões lineares e não-lineares. Recentemente, ganharam destaque técnicas de aprendizado de máquina, tais como as redes neurais artificiais (RNAs), que se destacam pela possibilidade de trabalhar com grandes bancos de dados, um desafio para os métodos tradicionais de regressão.

As redes neurais artificiais (RNAs) aparecem como uma das técnicas mais populares e amplamente aplicadas na implementação de *PTFs* (SHAHIN, 2013). As *RNAs* se destacam graças à sua capacidade de aprendizado e generalização, o que as permite resolver problemas complexos e não lineares (HAYKIN, 2009). Além disso, as *RNAs* não necessitam de definir um modelo *a priori*, sendo capazes de extrair relações implícitas entre os parâmetros de entrada e saída selecionados (SCHAAP; LEIJ; VAN GENUCHTEN, 2001). Essa característica está em contraste com a maioria dos modelos com base na física, geralmente simplificados com suposições e que exigem conhecimento prévio sobre a natureza das relações entre os dados (SHAHIN, 2013).

O desempenho das *RNAs* não está apenas relacionado a uma forte correlação entre os preditores e as propriedades a serem estimadas, mas também é influenciado pela qualidade e extensão do banco de dados utilizado na criação e na validação do modelo (SCHAAP; LEIJ, 1998). Para a maioria das regiões de solos tropicais do mundo, como o Brasil, não há dados hidráulicos do solo suficientes para o desenvolvimento de *PTFs*. Assim, é comum a aplicação de *PTFs* derivadas de solos temperados, onde bancos de dados extensos estão disponíveis, para regiões de solos tropicais (HAGHVERDI; CORNELIS; GHAHRAMAN, 2012). No entanto, vários estudos destacam o desempenho limitado nesses casos, principalmente devido às diferenças entre as propriedades físicas e químicas de solos temperados e tropicais (TOMASELLA; HODNETT; ROSSATO, 2000; BOTULA *et al.*, 2012; OTTONI *et al.*, 2018, 2019).

O trabalho de Barros e van Lier (2014) faz uma extensa revisão acerca de *PTFs* para estimativa da *CRAS* de solos brasileiros. Fatores como a utilização de bancos de dados limitados e/ou de regiões geográficas específicas e de alguns preditores não facilmente acessíveis, entretanto, limitam a utilização dessas *PTFs* (OTTONI *et al.*, 2018). Os autores destacam ainda a falta de organização e

disponibilidade de bancos de dados contendo informações sobre propriedades hidráulicas do solo como o motivo para o lento avanço no desenvolvimento de *PTFs* no Brasil. Contudo, o advento recente do *HYBRAS* (*Hydrophysical Database for Brazilian Soils*) (OTTONI *et al.*, 2018; 2019), criado com o objetivo de prover dados hidrofisicos consistentes de várias regiões do território brasileiro, possibilita o desenvolvimento de *PTFs* a partir de um banco de dados amplo e representativo de solos brasileiros.

Portanto, devido à natureza específica em termos de características físicas e hidráulicas dos solos brasileiros, os objetivos dessa pesquisa incluem (1) o desenvolvimento de *RNAs* de diferentes topologias para solos tropicais e subtropicais brasileiros utilizando o banco de dados *HYBRAS* e (2) a investigação de fatores que influenciam a capacidade de previsão das *RNAs*. A adoção de uma abordagem sistemática na criação de modelos de *RNAs* é vital para a obtenção de resultados satisfatórios e depende do uso ótimo da ferramenta. Por isso, o desenvolvimento de *RNAs* deve ser realizado levando em consideração fatores como a determinação adequada de entradas para o modelo, a escolha da estrutura e geometria ótima, e a validação de modelo gor meio de parâmetros estatísticos para avaliação da capacidade de previsão dos modelos (MAIER; DANDY, 2000b).

### 1.1 Objetivos

Esta dissertação objetiva avaliar o desempenho do uso de redes neurais artificiais (RNAs) para estimativa da curva de retenção de secagem (limite superior) de solos brasileiros para o intervalo de sucção entre 0 e 1500 kPa.

São objetivos específicos desta pesquisa:

- I. Estudar a relação entre as propriedades hidrofísicas das amostras do banco de dados HYBRAS (OTTONI et al., 2018, 2019), composto por solos tropicais e subtropicais brasileiros;
- II. Explorar a influência de fatores que influenciam a capacidade de estimativa das RNAs, tais como a topologia, a estrutura e a geometria das RNAs, e a importância relativa das propriedades de entrada utilizadas: distribuição granulométrica, densidade aparente seca do solo, densidade dos sólidos, porosidade total e teor de matéria orgânica;

- III. Comparar o desempenho de duas topologias no desenvolvimento de RNAs: pontuais (PT-RNAs) e pseudocontínuas (PC-RNAs);
- IV. Fornecer um modelo hierárquico que permita a estimativa da *CRAS* limite superior de secagem para amostras de solo com informações limitadas ou detalhadas de suas propriedades físicas;
- V. Avaliar e otimizar a capacidade de predição dos modelos de *RNAs* treinadas a partir de análises estatísticas.

### 1.2 Organização da Dissertação

Este trabalho é organizado em cinco capítulos, conforme descrito a seguir:

No **Capítulo 1** são apresentados a justificativa do tema proposto e os objetivos da pesquisa, bem como a metodologia e estruturação da dissertação.

No **Capítulo 2** é apresentada uma revisão bibliográfica acerca dos temas envolvidos nesta dissertação, com o embasamento teórico necessário para entendimento dos fenômenos relacionados à curva de retenção de água no solo e às redes neurais artificiais.

No **Capítulo 3** é feita a caracterização do banco de dados utilizado e apresentada a metodologia realizada para treinamento das redes neurais artificiais.

No **Capítulo 4** são apresentados os resultados obtidos após treinamento das redes neurais artificiais, bem como a análise dos resultados. São apresentadas comparações de desempenho entre diferentes modelos e estruturas de *RNAs* na estimativa da curva de retenção limite de secagem de água no solo.

No **capítulo 5** são apresentadas e consolidadas as conclusões obtidas pela pesquisa, as limitações encontradas, e apresentadas sugestões de pesquisas que poderão ser realizadas no desenvolvimento de trabalhos futuros.

Por último são apresentadas as **Referências** utilizadas e os **Anexos**.

A relação constitutiva entre o teor de umidade e a sucção no solo é denominada curva de retenção (ou característica) de água no solo, *CRAS*, ou do inglês, *Soil Water Retention Curve*, *SWRC*. Para o solo na condição não saturada, o volume de água armazenado nos vazios do solo não é fixo no tempo e no espaço e é dependente de fatores intrínsecos aos solos, como o tamanho dos poros e a estrutura do solo; e de fatores externos, relacionados às condições ambientais e climáticas, tais como a condição da superfície do solo, a intensidade e duração das chuvas e os períodos de seca, por exemplo (FREDLUND; RAHAHDJO, 1993; ZHOU; HUANG; SHENG, 2016).

Entender o comportamento geral de *CRAS* e sua relação com as propriedades físicas do solo é um componente básico para o desenvolvimento de funções de pedotransferência para a sua previsão, como as *RNAs*. Esse capítulo, portanto, é dedicado ao entendimento dos conceitos fundamentais da *CRAS*, tais como os mecanismos de retenção de água, os fatores que influenciam o formato da *CRAS* e os métodos diretos e indiretos para sua previsão. Ênfase é dada para a técnica das *RNAs* para a estimativa indireta da *CRAS*.

### 2.1 Sucção do Solo

A definição de sucção passa pelo entendimento do termo potencial de água no solo. A sucção total do solo quantifica o potencial termodinâmico da água dos poros do solo em relação ao potencial de referência da água livre – estado no qual o sistema encontra-se livre de solutos, apresenta interface líquido-gás plana e sem forças externas além da gravidade (LU; LIKOS, 2004). Na condição não saturada, os mecanismos físico e físico-químico responsáveis pelo potencial total do solo ( $\psi_t$ ) são aqueles que diminuem o potencial da água dos poros em relação ao estado de referência: potencial mátrico ( $\psi_m$ ), potencial osmótico ( $\psi_o$ ) e o potencial gravitacional ( $\psi_g$ ) (LU, 2019). É conveniente separar o potencial total nesses componentes, conforme Equação 1:

$$\psi_t = \psi_m + \psi_o + \psi_g \tag{1}$$

O potencial gravitacional não é relevante para a caracterização constitutiva do solo (BAKER; FRYDMAN, 2009). O potencial osmótico ( $\psi_0$ ) está relacionado à presença de solutos dissolvidos na água dos poros. A fonte desses solutos pode ser externa (oriunda de processos de lixiviação), ou natural, pela adsorção pelos minerais do solo (cátions trocáveis adsorvidos pelas partículas de argila) (LU; LIKOS, 2004). Por ser praticamente constante em toda a faixa de teor de umidade no solo e ter baixa influência quando comparado ao potencial mátrico, essa parcela é usualmente desprezada para a maioria dos problemas geotécnicos envolvendo solos não saturados (FREDLUND; RAHARDJO, 1993).

O potencial mátrico está relacionado aos efeitos combinados de capilaridade e adsorção de água nas partículas de solo (LU, 2019). A capilaridade ocorre devido à presença da interface ar-água curva nos poros do solo, enquanto a adsorção está relacionada aos campos de força elétricos e de van der Waals que ocorrem na interface sólido-líquido (isto é, água e partículas sólidos do solo) (LU; LIKOS, 2004). Assim, o potencial matricial ( $\psi_m$ ) pode ser expresso como:

$$\psi_m = \psi_{ad} + \psi_{cp} \tag{2}$$

onde  $\psi_{ad}$  é a contribuição da adsorção no potencial mátrico em uma camada de água adsorvida, e  $\psi_{cp}$  é a contribuição da capilaridade (BAKER; FRYDMAN, 2009).

O potencial capilar ( $\psi_{cp}$ ) pode ser definido e quantificado pela equação de Young-Laplace, que o define como a diferença entre a pressão de ar ( $u_a$ ) e a poro pressão da água ( $u_w$ ). Essa diferença de pressão ( $u_a$ - $u_w$ ) é erroneamente e comumente denominada sucção mátrica na literatura pois não considera a contribuição da adsorção. De fato, quando a adsorção é dominante – especialmente para altas sucções, a pressão de água nos poros varia de ponto para ponto do solo (LU, 2019). Portanto, uma maneira mais geral de definir a sucção mátrica é como o negativo do potencial mátrico ( $\psi_m$ ) (LU, 2019).

Baker e Frydman (2009) destacam que os métodos de medição de "sucção", em verdade, medem o potencial de água no solo (total ou mátrico) ao invés de um estado de pressão. Nesta dissertação o termo sucção (h) será utilizado para se referir ao potencial mátrico de água no solo medido. De

fato, o potencial da água dos poros do solo pode ser expresso como energia por unidade de massa (potencial,  $\psi$ ) como energia por unidade de volume (sucção, h) ou como energia por unidade de peso (carga, s) (LU; LIKOS, 2004). A conversão entre unidades de potencial, sucção e carga pode ser alcançada considerando a seguinte equivalência:

$$\psi = h * v_w = s * g * w_w \tag{3}$$

onde g é a aceleração da gravidade,  $m_w$  e  $v_w$  são a massa e o volume de água, respectivamente.

Para teores de umidade elevados e valores de sucção (h) correspondentemente baixos, o mecanismo que controla a retenção de água no solo é a capilaridade, função da estrutura de partículas e poros e distribuição do tamanho de poros (LU, 2016). Similarmente a tubos capilares, a magnitude da sucção mátrica nos solos é governada pelo tamanho dos poros, que funcionam como tubos capilares de pequeno diâmetro. Quanto menor o tamanho do poro do solo, maior a altura da ascensão capilar e maior a energia necessária para remoção dessa água (RIDLEY *et al.*, 2003). A ascensão no solo, entretanto, é irregular, devido a não-uniformidade na distribuição do tamanho dos poros.

Quando o teor de umidade é relativamente baixo, com altos valores de sucção correspondentes, o mecanismo dominante é a adsorção, governado pelas propriedades da superfície dos sólidos do solo. O efeito é mais pronunciado para a água adsorvida pelas partículas de argila, que possuem maior carga líquida e área de superfície elevada (LU; LIKOS, 2004). Além disso, a força de van der Waals decai à medida que a distância da superfície das partículas aumenta e por isso, os efeitos são mais relevantes em situações de baixo teor de umidade, quando a água adsorvida se encontra sob a forma de finos filmes revestindo a superfície das partículas (LU; LIKOS, 2004).

### 2.2 Formato e Parâmetros da Curva de Retenção de Água no Solo (CRAS)

A *CRAS* relaciona o teor de umidade e a sucção do solo. O teor de umidade no solo corresponde a quantidade de água presente nos poros do solo e pode ser representado pela umidade gravimétrica (w), umidade volumétrica ( $\theta$ ), ou grau de saturação (S). Se a amostra não sofre variação de volume com o aumento da sucção aplicada, as três variáveis podem ser interpretadas similarmente (FREDLUND, 2002). É prática comum traçar a sucção matricial para a faixa mais baixa de valores

de sucção (até aproximadamente 1500 kPa); e as sucções totais, quando acima desse valor. Isso funciona porque a maioria dos fenômenos está ligado principalmente à sucção mátrica na faixa de sucção mais baixa (por exemplo, permeabilidade e resistência ao cisalhamento) e ligada à sucção total na faixa de sucção mais alta (por exemplo, evaporação) (FREDLUND, 2002; 2006).

Em geral, a *CRAS* apresenta um formato bem definido e pode ser dividida em três trechos: a zona saturada, a zona de desaturação e a zona residual. Os trechos podem ser facilmente visualizados quando a representação gráfica inclui um intervalo de baixos valores de sucção (0.1 kPa) até altos valores ( $10^6$  kPa) e por isso a escala semi-logarítmica é mais adequada. A Figura 1 ilustra as curvas limites para um solo incompressível (porosidade constante) obtidas pelos processos de secagem e umedecimento, bem como alguns parâmetros característicos, como o a umidade volumétrica saturada ( $\theta_{sat}$ ), o valor de entrada de ar (*air entry value*, AEV) e a umidade volumétrica residual ( $\theta_r$ ).

O primeiro trecho corresponde a zona saturada do solo, em que os poros se encontram totalmente preenchidos por água. O trecho se inicia com valor de sucção próximo a zero e se estende até o AEV, que designa a sucção na qual o ar começa a entrar no maior poro do solo (FREDLUND; XING, 1994). Portanto, corresponde a máxima sucção que os poros do solo são capazes de suportar sem ocorrência de drenagem. Solos com poros grandes e uniformes possuem valores de AEV relativamente baixos. Nessa faixa de altos valores de teor de umidade e baixos valores correspondentes de sucção, o mecanismo dominante de retenção de água nos poros é a capilaridade (LU; LIKOS, 2004).

No segundo trecho, denominado zona de transição, o solo sofre drenagem sob o efeito do aumento da sucção que esvazia os poros progressivamente menores, até que, a pressões muito altas, somente poros muito pequenos conseguem reter água. Esse trecho corresponde ao intervalo entre o AEV e a umidade volumétrica residual ( $\theta_r$ ).



Figura 1 – Típica curva de retenção de água no solo (CRAS)

Fonte: Autor (2020) - Adaptado de Fredlund e Xing (1994)

A partir do  $\theta_r$  se inicia o terceiro trecho, denominado zona residual, onde a remoção de água ocorre especialmente por processos de transferência de vapor (FREDLUND; RAHARDJO; FREDLUND, 2012). No estado residual de saturação, a fase líquida torna-se descontínua e por isso são necessários grandes valores de sucção para que ocorra a remoção de água adicional do solo (VANAPALLI; FREDLUND; PUFAHL, 1999). A parcela de adsorção da sucção mátrica é predominante neste trecho.

Um comportamento característico das curvas de retenção refere-se ao fenômeno da histerese, que implica em diferenças na trajetória da *CRAS* quando a sua determinação é realizada pelo método de secagem ou por umedecimento. Esse comportamento se deve a fatores como a não uniformidade geométrica dos poros, ao aprisionamento de bolhas de ar e às variações do ângulo de contato no processo de secagem e umedecimento (FREDLUND; RAHARDJO; FREDLUND, 2012). De forma geral, para uma mesma magnitude de sucção, o solo tende a reter maior quantidade de água nos processos de secagem, como mostrou a Figura 1. A histerese indica, portanto, a existência de infinitas curvas intermediárias entre as curvas limites de secagem e umedecimento.

Tami, Rahardjo e Leong (2004) alertam para o uso das propriedades hidráulicas do solo de acordo com o processo que os solos realmente experimentam em campo. Assim, devem ser utilizadas as propriedades da curva de secagem para processos de dessorção de água, com consequente redução do teor de umidade no solo, e da curva de umedecimento para processos de sorção de água.

### 2.3 Fatores de Influência na CRAS

A forma geral da *CRAS*, mais suave ou acentuada, é influenciada por diversos fatores que incluem a estrutura do solo, a distribuição do tamanho dos poros, a distribuição granulométrica, a densidade, o teor de matéria orgânica, o teor de argila e a mineralogia no comportamento de retenção de água nos poros (LU; LIKOS, 2004).

A transição entre o regime de alta sucção dominado pelos mecanismos de adsorção e o regime de baixa sucção dominado pelos mecanismos capilares é altamente dependente do tipo de solo. Os solos arenosos, por apresentarem grandes poros interconectados em sua estrutura e interação praticamente nula entre seus grãos e a água, possuem pequena capacidade de retenção de água. A *CRAS* para esses solos é bem acentuada, com trechos bem definidos e controlada principalmente pela distribuição dos poros do material (LU; LIKOS, 2004). Quanto mais íngreme a inclinação, mais estreita é a distribuição do tamanho dos poros (GITIRANA; FREDLUND, 2004). A capilaridade governa o mecanismo de sucção para a maior faixa de teor de umidade, resultando em um AEV relativamente baixo.

Devido a sua capacidade de interação com a água, elevada atividade elétrica superficial e área superficial elevada, os solos argilosos são caracterizados pela maior capacidade de retenção de água para uma mesma sucção aplicada a solos arenosos (LU; LIKOS, 2004). Em geral, maior quantidade de água será retida na mesma sucção para solos contendo maior fração argila e maior plasticidade (FREDLUND; XING, 1994; MASROURI; BICALHO; KAWAY, 2008). Portanto, maiores serão os valores esperados para a  $\theta_{sat}$  para os solos argilosos quando comparados com os solos arenosos e siltosos.

Os solos predominantemente siltosos apresentam comportamento intermediário entre os solos argilosos e arenosos. Devido a presença de menores poros, os solos predominantemente siltosos possuem maior capacidade de retenção de água do que os solos arenosos (GITIRANA; FREDLUND, 2004).

A Figura 2 apresenta curvas características de uma areia bem graduada, uma areia fina uniforme, uma areia grossa uniforme e uma areia de granulação aberta, evidenciando o papel da distribuição granulométrica na capacidade de retenção do solo, especialmente para os solos grossos. O solo, como um material poroso, possui poros de diferentes dimensões. Uma ferramenta simples que fornece informação sobre o tamanho dos sólidos do solo, e, ao mesmo tempo, sobre a dimensão dos poros do solo, é a distribuição granulométrica. Por isso, é observado um comportamento similar entre as duas curvas, uma vez que o tamanho dos sólidos e dos vazios tendem a apresentar uma relação inversamente proporcional.



Figura 2 - Formato típico de curvas de retenção para areias com diferentes granulometrias

Fonte: Adaptado de Gitirana Jr., Marinho e Soto (2015)

De modo geral, observa-se a influência do tamanho das partículas sólidas do solo e da variabilidade de tamanhos dessas partículas. Da Figura 2, Gitirana Jr., Marinho e Soto (2015) concluem que:

- Materiais de granulometria mais fina exigem maiores valores de sucção para sofrerem drenagem o que pode ser observado quando comparadas as curvas para areia fina e grossa;
- O comportamento íngreme da curva de distribuição granulométrica de uma areia uniforme se repete na *CRAS*. Praticamente todos os poros do solo são drenados em um pequeno intervalo de sucções. Para a areia bem graduada, por outro lado, a curva se apresenta mais suave, com maior intervalo de sucção, devido a maior variabilidade de tamanhos de poros.
- Os "degraus" da curva de distribuição granulométrica da areia de gradação aberta se repetem na *CRAS* para esse solo,

Fredlund (2002) cita a influência do estado inicial da amostra e do histórico de tensões no formato da *CRAS*. A Figura 3 ilustra as diferenças para um mesmo solo com diferente histórico de tensões e método de preparação: indeformado, compactado e amolgado. O solo na condição indeformada apresenta sua estrutura natural. Quando a estrutura natural do solo é destruída (amostra amolgada), o índice de vazios aumenta e mais água é retida sob baixas sucções. Por outro lado, a amostra compactada está associada a uma redução do índice de vazios do solo e, consequentemente, menor capacidade de retenção de água em comparação ao mesmo solo na condição indeformada. As diferenças são especialmente importantes para valores baixos de sucção e se tornam menos críticas para altos valores de sucções (LU; LIKOS, 2004).

Fredlund (2002) destaca ainda a influência do estado inicial e do histórico de tensão do solo na forma de interpretação dos dados experimentais. Para argilas expansivas, pode ocorrer variação de volume durante a realização do ensaio, de forma que a umidade volumétrica ( $\theta$ ) deixa de ser uma constante e a interpretação da *CRAS* utilizando a umidade gravimétrica (w) se torna fisicamente mais significativa (LU; LIKOS, 2004).

Vanapalli, Fredlund e Pufahl (1999) adicionam ainda o efeito da estrutura do solo pela variação da umidade inicial da amostra. Os autores propõem diferentes curvas de retenção de água no solo para um solo argilo-arenoso moldado em três condições: no lado seco, no lado úmido e na umidade ótima da curva de compactação. As amostras moldadas no lado seco, de estrutura floculada, contêm espaços de poros interconectados relativamente grandes, o que facilita a drenagem. Dessa forma, valores baixos de sucção são suficientes para remoção de água e por isso menores valores de *AEV* são esperados, como mostra a Figura 4.



Figura 3 - Influência do histórico de tensões e do método de preparação da amostra na CRAS

Fonte: Adaptado de Fredlund (2002)



Figura 4 - Influência da estrutura do solo pela variação do teor de umidade inicial na CRAS

### 2.4 Métodos Diretos para Estimativa da CRAS

Objeto de interesse em diversos problemas envolvendo os solos não saturados, a sucção e a *CRAS* podem ser obtidas experimentalmente por meio de vários ensaios, de laboratório e de campo. As técnicas experimentais variam amplamente em termos de custo, complexidade e faixa de medição. Por isso, a escolha da melhor técnica para determinar a *CRAS* de um solo depende de fatores como a aplicação pretendida, os recursos humanos e financeiros disponíveis e a magnitude das sucções que devem ser estabelecidas (MASROURI; BICALHO; KAWAY, 2008).

O componente de sucção medido e a abrangência de valores ao qual se aplicam são mostrados na Tabela 1 para algumas técnicas de comum utilização, tais como o tensiômetro, a placa de pressão, o sensor de condutividade elétrico/térmico e o método do papel filtro com contato, para medição do componente mátrico de sucção; e o psicrômetro, higrômetro, sensor de capacidade e papel filtro sem contato para medição do componente de sucção total. Uma descrição abrangente dessas técnicas para medição ou controle da sucção pode ser encontrada em Fredlund, Rahardjo e Fredlund (2012).

Componente de Sucção Medida	Técnica	Faixa de Medição (kPa)	
	Tensiômetro	0 - 100 kPa	
Matricial	Sensor de Condutividade Térmica e Elétrico	0 - 400 kPa	
Matriciai	Placa de pressão	0 - 1500 kPa	
	Papel filtro com contato	0 - 10^6 kPa	
	Psicrômetro	100 - 8000 kPa	
T-4-1	Higrômetro	1000 - 450000 kPa	
Totai	Papel filtro sem contato	1000 - 500000 kPa	
	Sensores de Capacidade	0 - 10^6 kPa	

Tabela 1 - Intervalo de sucção para algumas técnicas de medição

As técnicas experimentais para medição direta da *CRAS* fornecem uma série de pontos que compreendem a relação entre a sucção do solo e o teor de umidade associado na condição de equilíbrio. Para aplicação na modelagem de fenômenos de fluxo, tensões e fenômenos de deformação do solo, entretanto, é útil que a *CRAS* seja expressa em forma de equação matemática contínua. A Tabela 2 descreve algumas das equações propostas na literatura para representação

analítica da *CRAS*. Leong e Rahardjo (1997) mostram que todas as equações podem ser derivadas de uma única forma genérica e possuem natureza empírica. A maioria dessas equações apresenta a curva no formato sigmoidal.

Referência	Equação	Parâmetros	
Gardner (1958)	$\Theta = \frac{1}{1 + (a_g h)^{n_g}}$	h = sucção ag, ng = parâmetros de ajuste	
Brooks e Corey (1964)	$\Theta = \left(\frac{h_b}{h}\right)^{\lambda} para \ h > h_b$ $\Theta = 1 \ para \ h \le h_b$	$h_b$ = valor de entrada de ar ou <i>bubbling</i> pressure $\lambda$ = índice de distribuição de tamanho dos poros	
van Genuchten (1980)	$\Theta = \left[\frac{1}{(1+ \alpha h ^{n_{vg}})}\right]^{m_{vg}}$	$\label{eq:alpha} \begin{split} h &= sucção\\ \alpha;  n_{vg};  m_{vg} = parâmetros de ajuste\\ m_{vg} &= 1 - 1/n_{vg} \end{split}$	
Fredlund e Xing (1994)	$\theta(h) = C(h) \cdot \theta_s \left\{ \frac{1}{\ln\left[e + \left(\frac{h}{a_{fx}}\right)^{n_{fx}}\right]} \right\}^{m_{fx}}$ $C(h) = 1 - \frac{\ln\left(1 + \frac{h}{h_r}\right)}{\ln\left(1 + \frac{10^6}{h_r}\right)}$	$a_{fx}$ , $n_{fx}$ e $m_{fx}$ = parâmetros de ajuste $h_r$ = sucção correspondente a $\theta$ r C(h) = fator de correção	
$\Theta$ = teor de umidade normalizado: $\Theta = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$			

Tabela 2 – Equações propostas na literatura para representação analítica da  $C\!R\!AS$ 

As medições diretas de sucção, entretanto, são consideradas custosas e trabalhosas. Segundo Lu e Likos (2004), a complexidade e os custos dos ensaios estão ligados a fatores como: (a) a obtenção, transporte e preparação de amostras para os ensaios laboratoriais; (b) a instalação, manutenção e monitoramento de instrumentação de campo; e (c) a variabilidade espacial das propriedades do solo, que exige um número relativamente grande de ensaios para capturar as características e condições no campo. Dessa forma, se torna economicamente inviável a medição dos parâmetros hidráulicos em cobertura espacial e temporal suficiente (VAN LOOY *et al.*, 2017).

Por essas razões, alternativas aos métodos diretos de medição de sucção são importantes no estudo dos solos não saturados. Neste sentido, emergem os estudos das funções de pedotransferência, que relacionam matematicamente propriedades do solo de fácil obtenção e menor custo com propriedades como a *CRAS*.

### 2.5 Métodos Indiretos - Funções de Pedotransferência

O uso das funções de pedotransferência (PTFs) é uma das ferramentas mais populares para superar as dificuldades associadas à medição da *CRAS*. As *PTFs* baseiam-se no fato de que a curva pode ser estimada a partir de propriedades facilmente obtidas em ensaios de campo ou laboratório. Nesse sentido, as *PTFs* agregam valor às informações do solo disponíveis traduzindo-as em propriedades de obtenção mais cara e trabalhosa. O desenvolvimento de PTFs para previsão das propriedades hidráulicas são recorrentes na literatura, em especial em solos de clima temperado, onde amplos bancos de dados se encontram disponíveis (OTTONI, 2017).

As estruturas matemáticas e estatísticas para o estabelecimento de relações entre as propriedades preditoras e a *CRAS* são variadas. Fredlund, Rahardjo e Fredlund (2012) categorizam as metodologias comumente empregadas em dois grupos principais: as abordagens semi-empíricas e empíricas. As semi-empíricas utilizam, por exemplo, a similaridade entre a *CRAS* e a curva de distribuição granulométrica cumulativa dos solos (ARYA; PARIS, 1981; HAVERKAMP; PARLANGE, 1986). Essas abordagens, entretanto, contém suposições e parâmetros empíricos, além de aplicabilidade limitada por exigir informações detalhadas sobre a distribuição granulométrica dos solos (BORGESEN; SCHAAP, 2005). Fredlund, Rahardjo e Fredlund (2012) adicionam ainda a não consideração de fatores como o histórico de tensões do solo, a histerese e a estrutura do solo.

Dessa forma, a maioria dos métodos para criação de *PTFs* são totalmente empíricos e os parâmetros são calibrados a partir dados hidráulicos de solo já existentes (SCHAAP; LEIJ; VAN GENUCHTEN, 2001; VAN LOOY *et al.*, 2017). Esse grupo cresceu principalmente a partir da disponibilidade de grandes bancos de dados hidráulicos não saturados, como o *UNSODA* (SCHAAP; LEIJ; VAN GENUCHTEN, 2001) e o *HYPRES* (WÖSTEN *et al.*, 1999), por exemplo.

Destacam-se as técnicas de regressão linear e não-linear e as técnicas de mineração de dados, como as redes neurais artificiais (RNAs), máquina de vetores de suporte (SVM), k-Nearest neighbord (kNN) e árvores de decisão (BARROS; VAN LIER, 2014; VAN LOOY *et al.*, 2017). Um forte interesse neste segundo grupo é observado recentemente e vários estudos têm demonstrado sua capacidade de modelar a complexa interação solo-água com desempenho superior frente aos modelos tradicionais (BOTULA *et al.*, 2013, VEREECKEN *et al.*, 2010, NGUYEN *et al.*, 2017).

Minasny, McBratney e Bristow (1999) dividem esse grupo de *PTFs* em três tipos: *PTFs* de classe, pontuais e paramétricas. O primeiro tipo estima as propriedades hidráulicas a partir de atributos físicos, como por exemplo a textura do solo, considerando que solos similares possuem propriedades hidráulicas semelhantes. Dessa forma, os valores médios de um determinado parâmetro para um grupo de solo são definidos e dito representativos de toda uma classe (CARSEL; PARRISH, 1988; WÖSTEN *et al.*, 1999; SCHAAP; LEIJ; VAN GENUCHTEN, 2001). A desvantagem das *PTFs* de classe, entretanto, está na variabilidade dos parâmetros existente dentro de uma mesma classe (VAN LOOY *et al.*, 2017).

As *PTFs* pontuais estimam o teor de umidade a uma sucção pré-definida e, portanto, não estabelecem a *CRAS* de uma forma contínua. As *PTFs* paramétricas estimam os parâmetros de um modelo hidráulico definido *a priori*, que expressa a *CRAS* em forma de uma equação bem definida, como os modelo de Brooks e Corey (1964) e van Genutchten (1980), definidas na Tabela 2. A vantagem da abordagem paramétrica é a definição contínua da *CRAS*, permitindo a computação dos valores hidráulicos para valores arbitrários de sucção (BORGESEN; SCHAAP, 2005). Entretanto, a forma real das *CRAS* pode não ser semelhante à forma da equação escolhida para todas as amostras de solo. Além disso, há dificuldade de correlação entre os parâmetros desses modelos e propriedades básicas dos solos, e as estimativas das *PTF* paramétricas são, em geral, menos precisas do que as PTFs pontuais (TOMASELLA *et al.*, 2003; VEREECKEN *et al.*, 2010).

Além dessas abordagens tradicionais, Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012) propuseram uma abordagem denominada pseudocontínua, que considera o logarítmico natural da sucção [ln(h)] como um parâmetro de entrada adicional ao modelo, permitindo ao usuário derivar a umidade volumétrica ( $\theta$ ) em qualquer sucção (h) desejada. Assim, ao usar uma ampla gama de sucções como entradas, uma ampla faixa correspondente do conteúdo de água é obtida, formando uma curva bem discretizada e portanto, pseudocontínua. Os autores provaram que o desempenho superior frente a *PTFs* paramétricas e um desempenho ligeiramente melhor que as *PTFs* pontuais.

As técnicas estatísticas tradicionais de regressão linear e não-linear oferecem modelos simples e de fácil interpretação, mas são sujeitas a desvantagens que incluem a determinação de um modelo a priori de relação entre os dados, e a dificuldade de lidar com extensas bases de dados (VEREECKEN *et al.*, 2010; WÖSTEN; PACHEPSKY; RAWLS, 2001). Considerando essas limitações, e o surgimento de dados de solos tropicais ao longo do tempo, é fundamental a promoção de técnicas de mineração de dados ou reconhecimento de padrões que sejam flexíveis o suficiente para lidar com grandes quantidades de dados e detectar tendências importantes entre os dados que podem estar ocultas nos métodos tradicionais (BOTULA *et al.*, 2013).

### 2.5.1 Estimativa Indireta da CRAS de Solos Brasileiros

As funções de pedotransferência (PTFs) desenvolvidas para estimativa da *CRAS* de solos brasileiros apresentam limitações. Embora representem um avanço na modelagem do comportamento hidráulico desses solos, os bancos de dados utilizados são geralmente de regiões geográficas específicas, e os solos utilizados são limitados em relação à capacidade de representar a grande variedade de classes de solos no território brasileiro (MEDRADO; LIMA, 2014; OTTONI *et al.*, 2018).

O trabalho de Barros e van Lier (2014) faz uma extensa revisão sobre as *PTFs* desenvolvidas para solos brasileiros. Em relação a *CRAS*, os autores destacam dois tipos principais de modelos criados a partir de regressões lineares e não-lineares: a) *PTFs* pontuais para estimativa da disponibilidade de água da planta, calculada a partir da capacidade de campo e do ponto de murcha permanente (usualmente definidos como  $\theta_{10}$  ou  $\theta_{33 \text{ kPa}}$  e  $\theta_{1500 \text{ kPa}}$ , respectivamente) (OLIVEIRA *et al.*, 2002; REICHERT *et al.*, 2009); b) PTFs paramétricas para estimativa dos parâmetros da equação de van Genuchten (1980) (TOMASELLA; HODNETT; ROSSATO, 2000; HODNETT; TOMASELLA, 2002; MEDRADO; LIMA, 2014). O trabalho de Tomasella e outros (2003) se destaca a partir da utilização de métodos de agrupamento de dados (*group method of data handling*) para a estimativa

de 6 pontos da *CRAS* e dos parâmetros da equação de van Genuchten (1980). A desvantagem dessa *PTF* é a utilização de uma variável denominada umidade equivalente, usualmente não disponível.

Na ausência de bancos de dados hidrofísicos amplos e organizados de solos brasileiros, estudos aplicam indiscriminadamente as *PTFs* elaboradas para solos de clima temperado em solos brasileiros de ambiente tropical, gerando resultados inconsistentes e tomadas de decisão inadequadas (BOTULA *et al.*, 2012). As diferenças estão relacionadas principalmente à mineralogia e às características de formação desses solos. Hodnett e Tomasella (2002) citam os processos de intemperismo e lixiviação em grandes áreas dos trópicos, que tendem a criar mineralogias particulares, menos comuns em regiões temperadas. Para os latossolos – estado de intemperismo final dos solos tropicais – os minerais predominantes na fração argila são a caulinita e os óxidos de ferro e alumínio (HODNETT; TOMASELLA, 2002). Adicionalmente, a fração de argila para solos temperados cobre minimamente a variação do teor de argila típico encontrado nos solos tropicais (de 60 a 90%) (TOMASELLA; HODNETT, 2004). Dessa forma, os solos tropicais de ambiente intemperizados são capazes de reter elevada quantidade de água em altas sucções e, devido ao fato da mineralogia influenciar na formação de ser semelhante a de solos de textura grossa (TOMASELLA; HODNETT; ROSSATO, 2000; TOMASELLA; HODNETT, 2004).

Para o banco de dados HYBRAS, utilizado nesta pesquisa, os estudos de Ottoni e outros (2018) e Ottoni e outros (2019) destacam a ineficiência de *PTFs* desenvolvidas para solos temperados na estimativa da *CRAS* limite de secagem e da condutividade hidráulica saturada (K<sub>sat</sub>), respectivamente. Os trabalhos apontam a natureza mineralógica e o teor da fração argila dos solos finos intemperizados (argissolos, latossolos e nitossolos) como as maiores diferenças no comportamento hidráulico entre solos tropicais brasileiros e os de clima temperado.

### 2.6 Redes Neurais Artificiais (RNAs)

As *RNAs* são uma forma de Inteligência Artificial que busca simular o funcionamento do cérebro humano e do sistema nervoso de forma simplificada por meio de sua unidade básica de processamento, o neurônio artificial. A capacidade de aprender por meio de exemplos e de
reconhecer padrões é um diferencial e uma das principais vantagens das *RNAs* (JAIN; MAO; MOHIUDDIN, 1996).

O neurônio artificial busca reproduzir as experiências sinápticas de comunicação existentes entre os neurônios biológicos. Os neurônios biológicos são unidades de processamento elementares do sistema nervoso, especializados no processamento de sinais e cuja capacidade está relacionada com a interconexão entre os neurônios, formando a rede neural biológica. O neurônio biológico é constituído basicamente por três elementos: o corpo celular ou soma, os dendritos e o axônio, conforme a Figura 5. Assim, um neurônio biológico pode ser visto como um dispositivo capaz de receber diversos estímulos de entrada de outros neurônios e propagar um único sinal de saída para vários outros.

Figura 5 – Partes constituintes do neurônio biológico



Fonte: Adaptado de Haykin (2009)

Em sua descrição matemática, os dendritos são representados no neurônio artificial por terminais de entrada ( $x_1, x_2,..., x_j$ ) e o axônio representado por apenas um terminal de saída ( $y_k$ ). A região intersináptica, onde ocorre o processamento de informações alterando o estado dos neurônios biológicos, é representada pelos valores de peso associados a cada entrada do neurônio ( $w_{k1}, w_{k2}, ..., w_{kj}$ ), uma função de soma e uma função de ativação *f*(.), conforme mostra a Figura 6.





Fonte: Adaptado de Haykin (2009)

Os valores das entradas para cada neurônio são multiplicadas pelos pesos de conexão, os quais são ajustáveis. Em cada neurônio, esses valores de entrada e um parâmetro de ponderação denominado *bias* ( $b_k$ ) são somados, formando uma combinação linear denominada  $u_k$ . O parâmetro *bias* tem o efeito de aumentar ou diminuir o valor da combinação linear das entradas do neurônio, a qual será submetida a uma função de ativação, dependendo se esse valor for positivo ou negativo, respectivamente (HAYKIN, 2009). A combinação linear  $u_k$  passa então por uma função de transferência não-linear (*f.*) para produzir uma saída do neurônio artificial  $y_k$ , que serve de entrada para os neurônios da próxima camada. Esse processo é resumido nas Equações 4 e 5:

$$u_{k} = \sum_{i=1}^{j} w_{ki} x_{i} + b_{k}$$
(4)

$$y_k = f(u_k) = f\left(\sum_{i=1}^j w_{ki}x_i + b_k\right)$$
(5)

A função de ativação f(.) é utilizada para limitar a amplitude da saída do neurônio a algum valor finito (RUMELHART; HINTON; WILLIAMS, 1986). Esse intervalo é comumente compreendido entre [0;1] ou [-1;1]. Uma série de funções podem ser utilizadas desde que contínuas e diferenciáveis. O uso de uma função de ativação não linear fornece a capacidade de resolver problemas complexos e não lineares (MAIER *et al.*, 2010). A Tabela 3 mostra alguns dos tipos mais utilizados. À medida que o conjunto de dados de entrada é apresentado à rede, os pesos sinápticos são ponderados. Esse processo representa a taxa de aprendizado adquirido da *RNA*, que se baseia no ajuste dos pesos sinápticos de forma a aproximar o valor de saída estimado pela rede ao valor esperado. O aprendizado das *RNAs* será discutido adiante.

Função de Ativação	Linear	Sigmoide ou logística (logsig)	Tangente hiperbólica (tanh)			
Equação	f(x) = x	$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$	$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$			
Representação Gráfica	f(x) +1 0 x	f(x) +1 0 x	f(x) +1 0 -1			

Tabela 3 – Tipos de	e funções	de	ativa	ção
---------------------	-----------	----	-------	-----

# 2.6.1 Arquitetura das Redes Neurais Artificiais (RNAs)

A estruturação e conexão dos neurônios em relação uns aos outros constitui a arquitetura das *RNAs*. No geral, Jain, Mao e Mohiuddin (1996) destacam duas classes fundamentais de redes:

- redes *feed-forward* de camada única ou de múltiplas camadas (*single-layer ou multi-layer feed-forward networks*): o processamento dos sinais ocorre de forma unidimensional de uma camada à outra, até atingir a camada de saída. Nas redes de camada única, os neurônios estão organizados em uma camada de entrada conectados aos neurônios em uma camada de saída, única na qual ocorre processamento de informações. As redes de múltiplas camadas distinguem-se pela presença de uma ou mais camadas ditas escondidas e compostas por neurônios escondidos, que possuem a função de interferir entre as camadas de entrada e saída, aumentando a eficiência do modelo.
- redes recorrentes (*recurrent networks*): se distinguem pela ocorrência de realimentação dos pesos, ou seja, os valores de saída de uma camada podem servir como dados de entrada

da mesma camada ou de uma camada intermediária. Dessa forma, um neurônio pode receber o seu próprio sinal de saída como entrada. São utilizadas especialmente em problemas de processamento temporal e podem possuir camadas escondidas ou não.

Os diferentes padrões de conexão resultam em diferentes comportamentos da rede. As redes *feed-forward* são redes estáticas, isto é, produzem apenas um conjunto de valores de saída quando um conjunto de entrada lhes é apresentado e sua resposta a uma entrada é independente do estado de rede anterior. O principal tipo é chamado de *perceptron* que pode possuir uma (*perceptron* simples) ou múltiplas camadas (*perceptron* multi-camadas, MLP), foco desta pesquisa. As redes recorrentes, por outro lado, são ditas dinâmicas, com a modificação do estado da rede conforme novos padrões de entradas são apresentados (JAIN; MAO; MOHIUDDIN, 1996). As redes competitivas, de Kohonen, de Hopfield e os modelos de teoria da ressonância adaptativa (ART) são exemplos de redes recorrentes, conforme Figura 7.



Figura 7 - Classificação das arquiteturas de redes feed-forward e redes recorrentes

Fonte: Adaptado de Jain, Mao e Mohiuddin, 1996)

A escolha do tipo de arquitetura para um problema deve levar em conta fatores como a complexidade do problema, a dimensionalidade dos espaço de entrada, as características dinâmicas

ou estáticas, o conhecimento a priori do problema e a representatitividade dos dados. (JAIN; MAO; MOHIUDDIN, 1996). A partir da escolha, a otimização da arquitetura indica a busca pelas funções de ativação apropriadas para os neurônios, do número ótimo de neurônios e de camadas escondidas, da disposição adequada dos neurônios nessas camadas e da escolha do algoritmo de aprendizagem (OJHA; ABRAHAM; SNASEL, 2017).

# 2.6.2 Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP)

O modelo *Perceptron* proposto por Frank Rosenblatt (ROSENBLATT, 1958) foi o primeiro modelo de neurônio artificial a introduzir o conceito de aprendizado supervisionado e se baseou no modelo de neurônio MCP (McCULLOCH; PITTS, 1943). O modelo é a forma mais simples de uma rede neural utilizada na classificação de padrões desde que esses padrões sejam linearmente separáveis (HAYKIN, 2009).

A topologia originalmente proposta pelo autor consistia em uma camada de unidades de entrada (retina), uma camada de unidades ocultas, denominada camada associativa e composta por pesos fixos definidos *a priori*, e uma camada de saída, formada pelas unidades de resposta. Apesar dos três níveis, o modelo é denominado *perceptron simples* pelo fato da camada de saída ser a única adaptativa, ou seja, com pesos ajustáveis a partir de um algoritmo de treinamento. Por essa razão, o modelo limita-se a resolução de problemas lineares.

O modelo de Rosenblatt, entretanto, foi duramente criticado no trabalho de Minsky e Papert (1969), que em suas análises matemáticas provaram que o modelo era inerentemente incapaz de realizar algumas generalizações globais com base em exemplos aprendidos localmente. Isso causou um enorme impacto no estudo das *RNAs*, levantando sérias dúvidas a respeito de suas capacidades computacionais, mas superadas especialmente a partir da descrição do algoritmo *back-propagation* (RUMELHART; HINTON; WILLIAMS, 1986), que permitiu um método computacionalmente eficiente no treinamento de redes MLP.

O Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP) é um tipo de rede *feed-forward* de várias camadas, o que permite a sua utilização na solução de problemas não-lineares e de maior complexibilidade. O

sucesso na utilização desse modelo ocorre a partir do algoritmo de *back-propagation*, baseado na regra de aprendizado supervisionado por correção de erros. Haykin (2009) enumera três características principais dos MLP:

- a) As não-linearidades são incorporadas ao modelo por meio de funções de ativação nãolineares, diferenciáveis em qualquer ponto. As redes MLP com mais de uma camada intermediária são capazes de aproximar qualquer função (CYBENKO, 1989).
- b) A rede possui uma ou mais camadas de neurônios escondidos que não fazem parte das camadas de entrada ou saída. Isso permite o aprendizado de regras complexas e a extração das características significativamente mais importantes dos padrões de entrada
- c) A rede exibe um alto grau de conectividade entre seus neurônios. A mudança de uma conexão afeta todas as outras.

As redes do tipo MLP são constituídas por um conjunto de neurônios que formam a camada de entrada, uma ou mais camadas ocultas de neurônios e uma camada de saída. O fluxo de sinal progride para a frente, de camada para camada, até a de saída, conforme a Figura 8.



Figura 8 - Arquitetura de um Perceptron de múltiplas camadas com duas camadas ocultas

Fonte: Adaptada de Haykin (2009)

Duas tarefas para a solução de um problema usando um RNA do tipo MLP envolvem: descobrir uma função apropriada (isto é, a otimização da arquitetura) e descobrir um vetor de pesos apropriados (isto é, a otimização de pesos) usando algum algoritmo de aprendizado (OJHA; ABRAHAM; SNASEL, 2017).

# 2.6.3 Paradigmas de Aprendizagem

A capacidade de aprender a partir do ambiente e de melhorar o seu desempenho a partir da aprendizagem é uma das características fundamentais das *RNAs*. O processo de aprendizado de uma *RNA* ocorre a partir de um processo iterativo de ajustes nos pesos sinápticos que são modificados com a apresentação de novos dados a rede. Idealmente, após cada iteração a rede se torna mais instruída (HAYKIN, 2009).

O processo de aprendizado ocorre a partir da definição de determinados critérios que interferem na modificação dos pesos. A um conjunto pré-estabelecido de regras bem-definidas para o ajuste dos pesos sinápticos denomina-se *algoritmo de aprendizagem*. Essa aprendizagem pode ser supervisionada ou não-supervisionada.

A aprendizagem supervisionada ou aprendizagem com um professor ocorre a partir da apresentação à rede de um conjunto de exemplos de entrada com uma resposta (saída) conhecida. Sendo a resposta da rede função dos valores atuais dos pesos sinápticos, estes são ajustados de forma que o erro entre a resposta estimada pela rede e a resposta esperada seja o menor possível. O processo de minimização do erro ocorre, portanto, de maneira iterativa (OJHA; ABRAHAM; SNASEL, 2017).

Na aprendizagem não-supervisionada ou aprendizagem sem um professor, apenas as entradas são apresentadas à rede, não havendo uma resposta correta associada. Neste tipo de aprendizagem, a *RNA* necessita explorar os padrões implícitos existentes entre os dados e o aprendizado ocorre a partir de regularidades de dados que permitam o agrupamento de padrões similares, sendo ideal para problemas de categorização (HAYKIN, 2009). Há ainda o aprendizado híbrido, que combina os dois tipos citados.

O algoritmo de aprendizagem por correção de erros é utilizado em redes *feed-forward* de uma ou múltiplas camadas do tipo *perceptron* com aprendizado supervisionado e para redes de múltiplas camadas com aprendizado não supervisionado. É utilizado especialmente em problemas de classificação, aproximação de funções e previsão e controle. O algoritmo *back-propagation* é um exemplo, sendo o mais comumente utilizado em problemas da Engenharia Geotécnica e por isso, foco neste trabalho (DYMINSKI, 2000; DAS, 2013).

# 2.6.4 Algoritmo de aprendizado back-propagation

O processo de aprendizado *back-propagation* consiste basicamente em duas etapas: uma fase de propagação, dita para frente, em que um exemplo de entrada é aplicado aos neurônios de entrada da rede e seus sinais se propagam camada por camada até que uma saída seja produzida pela rede; e uma fase de retropropagação, no sentido contrário, em que o erro calculado pela diferença entre a saída obtida da rede  $(y_{i,est})$  e a saída esperada  $(y_{i,esp})$  é retropropagado pela rede, camada a camada. Os pesos sinápticos são então ajustados ou "corrigidos" de forma a tornar a resposta da rede a mais próxima possível da saída desejada. Esse é um processo iterativo que se encerra quando algum critério de parada é atendido. Haykin (2009) descreve o algoritmo *back-propagation* e alguns detalhes são aqui expostos.

Uma RNA é treinada fornecendo os dados de treinamento (X,Y) de *q* pares de entrada-saída, isto é, X = (x<sub>1</sub>, x<sub>2</sub>, ..., x<sub>q</sub>) e Y = (y<sub>1</sub>, y<sub>2</sub>, ..., y<sub>q</sub>). Cada entrada  $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, ..., x_{iE})$  é um vetor de dimensão *E* (número de entradas) e está associado a um vetor de saída desejado y<sub>i</sub> = (y<sub>i1</sub>, y<sub>i2</sub>, ..., y<sub>iZ</sub>) de dimensão Z (número de saídas). Para o conjunto de treinamento, cada iteração *t* produz um vetor  $\hat{Y} = (\hat{y}1, \hat{y}2, ..., \hat{y}q)$ , onde cada vetor  $\hat{y}i = (\hat{y}i1, \hat{y}i2, ..., \hat{y}iq)$  é comparado com o vetor de saída desejado para todos *i* de 1 até *q* usando uma determinada função erro.

Conforme mostrado na Equação 5, a saída de um neurônio  $(y_{i,est})$  é função da soma do bias  $(b_k)$  e do produto entre os pesos sinápticos  $(w_{jk})$  e das conexões de entrada  $(x_i)$ . Essa saída é limitada dentro de um intervalo determinado pela amplitude da função de ativação.

Uma regra comumente utilizada para a redução e minimização da função erro é a regra delta, na qual o vetor de pesos sinápticos ajustáveis *w*, é otimizado conforme a Equação 6:

$$w^{t+1} = w^t + \Delta w^t \tag{6}$$

Onde  $\Delta w^t$  é um fator de correção na enésima iteração t. Esse fator de correção é calculado como:

$$\Delta w_i^t = \eta^t e_i^t x_i^t \tag{7}$$

Onde  $\eta^t$  é uma constante que determina a taxa de aprendizado do algoritmo *de back-propagation* na iteração *t* e  $e_i^t$  é o erro na iteração t correspondendo ao i-ésima entrada apresentada para a RNA.

A taxa de aprendizagem é determinada de antemão. Quanto menor o valor definido, menor a variação dos pesos sinápticos de uma iteração para a outra na trajetória no espaço de pesos, porém a taxa de aprendizagem é lenta. Valores altos, por sua vez, tornam a rede instável com modificações grandes nos pesos sinápticos (HAYKIN, 2009).

O valor de  $e^t$  representa uma medida da performance de aprendizado da rede neural. Esse valor é função de todos os parâmetros livres, isto é, todos os pesos sinápticos e bias da *RNA* e o objetivo do algoritmo de treinamento é minimizá-lo valor de por meio do ajuste desses parâmetros. O valor do erro na iteração t ( $e^t$ ) de um neurônio de saída j é comumente calculado pelo erro médio quadrático (MSE):

$$e_{i}^{t} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y_{i,esp} - y_{i,est})^{2}$$
(8)

No caso dos neurônios das camadas escondidas, não existe uma resposta desejada especificada para o cálculo do erro. O sinal de erro desses neurônios deve ser, dessa forma, ponderado em termos dos erros de todos os outros neurônios aos quais ele está diretamente conectado.

#### 2.6.4.1 Algoritmo Levenberg-Marquardt

A partir da popularização da utilização do algoritmo *back-propagation*, várias pesquisas foram realizadas com o intuito de acelerar a convergência do algoritmo. Dreyfus (2005) destaca que o tempo de convergência de métodos de gradiente descendente, como o algoritmo *back-propagation*, é muito maior do que os métodos de segunda ordem, como o método de Gauss-Newton (Osborne, 1992), tanto em número de iterações quanto em tempo de computação. Maier e Dandy (2000b) acrescentam a sensitividade às condições iniciais e a susceptibilidade a mínimos locais da função de erro como outras limitações do algoritmo. Por outro lado, o método de Gauss-Newton apresenta convergência rápida, mas apenas quando a aproximação da função de erro quadrática é razoável. Caso contrário, o algoritmo se torna instável (YU; WILAMOWSKI, 2018).

Um dos trabalhos desenvolvidos neste sentido foi o desenvolvimento do algoritmo de Levenberg-Marquardt (LM) (LEVENBERG, 1944; MARQUARDT, 1963). O método é uma técnica de otimização numérica iterativa capaz de localizar o mínimo de uma função expressa como a soma de quadrados de outras funções não-lineares. O algoritmo funciona como um híbrido das técnicas de gradiente descendente e de Gauss-Newton, combinando a estabilidade do primeiro e a velocidade do segundo. Quando a solução atual está longe de ser a correta, o algoritmo se comporta como um método de gradiente descendente, porém mais acelerado. Quando a solução atual está próxima da solução correta, ela se torna um método de Gauss-Newton facilitando a convergência e a resolução de problemas mais complexos (DREYFUS, 2005; YU; WILAMOWSKI, 2018).

Computacionalmente, a velocidade do algoritmo *LM* está ligada a não necessidade do cálculo das derivadas de segunda ordem da função de erro total ou matriz Hessiana (H), aproximada conforme Equação 9.

$$H_n = J_t^T J_t + \mu_t I \tag{9}$$

onde I é a matriz identidade, J é a matriz jacobiana que contém a primeira derivada dos erros dos parâmetros livres da *RNA* e  $\mu$  é um parâmetro ajustado durante a fase de treinamento.

Dessa forma, a Equação 6 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$w_{ji}(t+1) = w_{ji}(t) - [J_t^T J_t + \mu_t I]^{-1} J_t^T e_t$$
(10)

A matriz Jacobiana (J) pode ser calculada através de uma técnica de retro propagação padrão e menos complexa do que H (YU; WILAMOWSKI, 2018). Quando  $\mu$  for igual a zero, o algoritmo LM se torna idêntico ao método de Newton. Por outro lado, quando  $\mu$  é suficientemente grande, o LM fica próximo ao algoritmo de gradiente descendente. O objetivo do algoritmo é a redução da função quadrática a cada iteração t. O método de Gauss-Newton é mais rápido e preciso, próximo a um erro mínimo, portanto, o objetivo é mudar para o método de Newton o mais rápido possível. Assim,  $\mu$  é reduzido após cada etapa bem-sucedida (redução na função de desempenho) e é aumentado apenas quando uma etapa experimental aumenta a função de desempenho.

# 2.6.5 Desenvolvimento de PTFs do tipo RNA

O processo de apresentação de um conjunto de dados e de utilização de uma regra de aprendizado para o ajuste dos pesos sinápticos de uma *RNA* para minimização dos seus erros é chamado de *aprendizado* ou *treinamento* das *RNAs*. A Figura 9 mostra as principais etapas no desenvolvimento de uma *RNA*. Maier e Dandy (2000b) e Shahin (2013) destacam que, para um melhor desempenho, as redes devem ser desenvolvidos de maneira sistemática, levando em consideração uma série de fatores que influenciam em sua performance, tais como: a determinação das entradas de maior importância do modelo, a divisão e pré-processamento dos dados, a escolha de arquitetura de rede adequada, o critério de parada de treinamento e a validação e robustez do modelo.



Figura 9 - Etapas no desenvolvimento de uma RNA

Fonte: Adaptado de Maier et al. 2000a

#### 2.6.5.1 Escolha das Variáveis de Entrada

A determinação apropriada das variáveis de entradas do modelo é um fator de impacto significativo na performance de um modelo de *RNA* (FARAWAY; CHATFIELD, 1998; KAASTRA; BOYD, 1995). Um conjunto de entradas representativo pode melhorar o desempenho do modelo substancialmente, mas apresentar um número tão grande de variáveis de entrada quanto possível ao modelo pode aumentar o seu tamanho e gerar perda de eficiência (MAIER; DANDY, 2000b).

Dentre as abordagens utilizadas, Shahin (2013) destaca que alguns pesquisadores desenvolvem diversas combinações entre as variáveis de entrada e selecionam o modelo que apresenta o melhor desempenho baseado em critérios estatísticos. Maier e Dandy (2000b) descrevem a técnica

*stepwise*, em que a partir do treinamento individual da rede com cada variável, é selecionada a variável de entrada de melhor performance, com as outras variáveis sendo adicionadas ao modelo uma a uma, até que não se obtenha melhoria adicional de performance.

Contudo, Shahin (2013) lembra que os erros de um modelo treinado não dependem apenas das entradas do modelo, mas de toda a estrutura e dos parâmetros de calibração do modelo, se tornando vagos na decisão de determinar se a entrada é significativa ou não. Uma forma de contornar esse problema são as abordagens sem modelo, baseadas em medidas de dependência linear, como correlação, para obtenção das entradas mais significativas no desenvolvimento de uma *RNA* (BOWDEN; DANDY; MAIER, 2003; MAY *et al.*, 2008). Na Engenharia Geotécnica, usualmente, a escolha das variáveis de entrada apropriadas para determinado modelo é baseada no conhecimento *a priori* do problema.

#### 2.6.5.2 Pré-processamento dos dados

O pré-processamento dos dados é feito para garantir que todos as variáveis de entrada recebam a mesma atenção durante a etapa de treinamento e é etapa fundamental na adequação da utilização de *RNAs* na Engenharia Geotécnica. Comumente, é realizado por meio da transformação ou escalonamento dos dados.

O escalonamento busca eliminar a influência de diferentes escalas dentre os parâmetros de entrada e saída de uma *RNA* (PHAM *et al.*, 2019). Por isso, antes do treinamento, é útil escalonar os dados dentro de um intervalo especificado, usualmente entre [0,1] ou [-1,1], a depender dos limites de aplicação da função de ativação empregada. Maier e Dandy (2000b) sugerem que o escalonamento não inclua os extremos.

Bowden, Dandy e Maier (2003) usaram diferentes métodos de transformação e verificaram que as transformações mais complexas não melhoraram o desempenho das redes treinadas. Shahin (2013) afirma que, na Engenharia Geotécnica, o escalonamento de dados é útil, mas a transformação de dados não melhora o desempenho dos modelos.

Ainda como pré-processamento, alguns autores sugerem a remoção dos chamados *outliers*, que se referem a valores atípicos dentro de um conjunto de dados. Embora o melhor desempenho das *RNAs* esteja associado com tamanho do banco de dados, o estudo de Pham e outros (2019) demonstra que a qualidade do banco de dados influencia significativamente a precisão das estimativas. Mesmo com a redução de 24% do número total de dados, melhores resultados são obtidos para o conjunto de dados sem os outliers. Dessa forma, valores discrepantes podem afetar negativamente o desempenho das *RNAs*. Entretanto, destaca-se que os *outliers* não necessariamente representam erros amostrais, mas padrões de baixa representatividade dentro do conjunto de dados.

#### 2.6.5.3 Divisão dos dados e Critério de Parada de Treinamento

O processo de validação cruzada (*cross-validation*) é frequentemente utilizado na modelagem de *RNAs*, sendo primeiramente proposto por Stone (1974). A validação cruzada requer a divisão aleatória dos dados em três conjuntos: treinamento, validação e teste. O conjunto de treinamento é utilizado para construção e ajuste dos pesos sinápticos do modelo a partir do algoritmo de aprendizado determinado. O conjunto de validação é utilizado para verificar o desempenho do modelo durante o treinamento e funciona como um critério de parada: quando o erro aumenta para o conjunto de validação, o treinamento é encerrado (*early stopping technique*). Finalmente, o conjunto independente de teste é composto por dados diferentes dos utilizados nos conjuntos anteriores para verificar a capacidade de generalização do modelo (SHAHIN, 2013).

A importância da divisão dos dados se dá pelo problema do *overfitting*, que diz respeito a perda de capacidade de generalização da rede neural. Isso ocorre quando o modelo aprende as peculiaridades do conjunto de treinamento levando à memorização e não à generalização (SHAHIN, 2013). O *overfitting* é caracterizado por uma diminuição contínua no erro do conjunto de treinamento enquanto o erro obtido conjunto independente, cresce. A Figura 10 ilustra esse problema. O erro de cada conjunto é verificado a cada iteração e o *overfitting* ocorre a partir do ponto de mínimo observado para o conjunto de testes.

Figura 10 - Representação do problema do overfitting



Fonte: Dyminski (2000)

Em relação à divisão dos dados dentre os subconjuntos, uma abordagem aleatória na divisão dos dados é geralmente empregada nas aplicações de *RNAs* em Engenharia Geotécnica (SHAHIN; MAIER; JAKSA, 2004; SHAHIN, 2013), mas a maneira como os dados são divididos pode ter significativo impacto nos resultados. Os conjuntos de dados de treinamento, teste e validação representam uma mesma população. Por isso, as propriedades estatísticas desses subconjuntos, como a média e o desvio padrão, precisam ser semelhantes, de forma a garantir que eles representem uma mesma população estatística (MASTERS, 1993). Esse fato é demonstrado por Shahin, Maier e Jaksa (2004), que prova a existência de uma relação direta entre a consistência estatística entre os conjuntos de treinamento, teste e validação e o desempenho do modelo, com a divisão arbitrária resultando no pior desempenho. Estudos de Minns e Hall (1996) e Tokar e Johson (1999) adicionam que os modelos de *RNA* têm melhor desempenho quando o conjunto de validação não extrapola além do intervalo dos dados usados na fase de treinamento.

O trabalho de Shahin, Maier e Jaksa (2004) também conclui que não existe uma relação clara entre a proporção de dados para treinamento, teste e validação e o desempenho do modelo. Em seus ensaios, o desempenho do modelo ótimo foi obtido quando 20% dos dados foram utilizados para validação, 56% dos dados para treinamento e 24% para testes. Hammerstrom (1993) sugere que dois terços dos dados sejam utilizado para treinamento e validação e um terço para testes. Nejad e outros (2009) sugerem 85% e 15%, respectivamente.

#### 2.6.5.4 Escolha da Arquitetura e Geometria das RNAs

A não existência de uma abordagem exata para a determinação da arquitetura ótima do modelo é um dos desafios da implementação de *RNAs*. Como o número de neurônios na camada de entrada e de saída de uma rede MLP é função das variáveis de entrada e saída, respectivamente, o aspecto crítico se torna a determinação do número de camadas escondidas e da quantidade de neurônios nessas camadas. Essa escolha determinará a quantidade de pesos sinápticos (ou parâmetros livres) em uma *RNA*. Na maior parte dos problemas de Engenharia Geotécnica, a obtenção do modelo ótimo ocorre por meio de tentativa e erro (SHAHIN, 2013).

Em relação ao número de camadas ocultas, Cybenko (1989) e Hornik, Stinchcombe e White (1989) demonstraram que 1 (uma) camada oculta é suficiente para aproximar qualquer função contínua, desde que existam pesos de conexão suficientes. Já o uso de mais de uma camada oculta fornece maior flexibilidade e permite a aproximação de funções complexas utilizando menos pesos de conexão (FLOOD; KARTAM, 1994). No entanto, Masters (1993) afirma que o uso de mais de uma camada oculta muitas vezes retarda o processo de treinamento e aumenta a chance do modelo de ficar preso em mínimos locais, e que redes com muitos parâmetros livres são mais sujeitas a problemas como o *overfitting*.

O número de neurônios escondidos é relacionado ao número de amostras de treinamento disponíveis, mas valores muito diferentes entre si são encontrados. Enquanto Masters (1993) sugere uma relação entre o número de amostras e de pesos de conexão do modelo igual a 2, Hush e Horne (1993) sugerem que esse valor seja 10. Amari *et al.* (1997) sugerem que o *overfitting* não ocorrerá se a relação for 30. O número de pesos sinápticos (P) de uma rede neural é definido pela Equação 11:

$$P = (E+1) * Ne + (Ne+1) * Z$$
(11)

Onde *E* e *Z* se referem ao número de entradas e saídas da *RNA* e *Ne* ao número de neurônios na camada escondida.

Das (2013) reúne 34 trabalhos nos quais, com exceção de 5 deles, o número de amostras de treinamento é maior do que o número de pesos sinápticos. Em nenhum desses trabalhos o problema de *overfitting* é relatado.

# 2.6.5.5 Avaliação do Desempenho e Validação do Modelo

A precisão de uma PTF é definida pela correspondência entre os dados observados e estimados durante a fase de calibração, e a confiabilidade é avaliada pela aplicação do modelo a um conjunto independente (WÖSTEN; PACHEPSKY; RAWLS, 2001). Diversos são os parâmetros estatísticos encontrados na literatura que buscam quantificar o erro entre os valores estimados e os valores esperados e a escolha do parâmetro adequado requer critério.

A raiz do erro quadrático médio (RMSE) é, usualmente, utilizada como principal medida estatística para avaliar o desempenho das *RNAs* para predição da *CRAS*. O coeficiente de Pearson (r) também é utilizado e permite a identificação de baixas correlações. Os resultados são considerados satisfatórios quando o *RMSE* é próximo a zero e o *r* se aproxima de 1.

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{N} (\theta_{i,lab} - \overline{\theta_{lab}}) (\theta_{i,est} - \overline{\theta_{est}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N} (\theta_{i,lab} - \overline{\theta_{lab}})^2 \sum_{i=1}^{N} (\theta_{i,est} - \overline{\theta_{est}})^2}}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} (\theta_{i,lab} - \theta_{i,est})^2}{N}}$$
(12)

onde N é o número de dados apresentados para o modelo;  $\theta_{i,lab}$  e  $\theta_{i,est}$  são as umidades volumétricas medidas e estimadas, respectivamente; e  $\overline{\theta_{obs}}$  e  $\overline{\theta_{est}}$  são as médias das umidades volumétricas medidas e estimadas, respectivamente.

O coeficiente de correlação de pearson (r) avalia a relação linear e a direção (se negativa ou positiva) dessa relação, mas sem o objetivo de explicar a causa e o efeito dessa relação. Quanto mais próximo de |1|, mais forte a correlação entre duas variáveis.

Também comumente utilizado, o coeficiente de determinação ( $r^2$ ) indica a porcentagem de variação nas respostas y que é explicada pelas variáveis independentes x. Quanto maior o  $r^2$ , maior a variabilidade explicada pelo modelo. O  $r^2$  é calculado como a razão da soma dos quadrados dos erros (que é a variação que não é explicada pelo modelo) pela soma total dos quadrados (que é a variação total no modelo), conforme a Equação 14. Entretanto, o valor de  $r^2$  sozinho não expressa necessariamente a credibilidade do modelo, uma vez que mesmo relações não lineares podem apresentar altos valores.

$$r^{2} = 1 - \frac{\sum_{i}^{n} \left(\theta_{i,obs} - \theta_{i,est}\right)^{2}}{\sum_{i}^{n} \left(\theta_{i,obs} - \overline{\theta_{obs}}\right)^{2}}$$
(14)

Uma vez que o modelo de RNA atinja uma performance estatística satisfatória durante a fase de treinamento, é necessário avaliar a sua capacidade de generalização a outros dados. A validação de um modelo de *RNA* é usualmente realizada por meio de um conjunto de teste independente composto por dados não utilizados na construção do modelo, e possui a finalidade de garantir que o modelo tenha a capacidade de generalizar dentro dos limites definidos pelos dados de treinamento de maneira robusta, ao invés de simplesmente memorizar as relações de entrada e saída contidas no conjunto de treinamento (SHAHIN, 2013).

Masters (1993) afirma que, se a diferença do erro obtido utilizando o conjunto de teste é muito diferente do erro do conjunto de treinamento, é provável que os dois conjuntos não sejam representativos da mesma população ou que tenha ocorrido o problema do *overfitting*. Maier e Dandi (2000b) acrescentam que essa diferença pode ocorrer devido a problemas relacionados a arquitetura de rede e a falta ou ao inadequado pré-processamento de dados e normalização dos dados de treinamento/validação.

# 2.7 Utilização de RNAs na Estimativa da CRAS - Trabalhos Anteriores

O desenvolvimento de *PTFs* do tipo *RNA* na previsão da *CRAS* é objeto de estudo em diversas pesquisas encontrados na literatura. Os trabalhos pioneiros nessa área foram desenvolvidos por Schaap e Bouten (1996) e Pachepsky, Timlin e Varallvay (1996), ambos para solos temperados na

Europa. Minasny, McBratney e Bristow (1999) realizaram estudos comparativos entre *RNAs* e modelos de regressão múltipla linear e não-linear para estimativa da *CRAS* de solos da Austrália, obtendo melhores resultados para a última abordagem. A partir do banco de dados *UNSODA*, Schaap, Leij e van Genuchten (2001) desenvolveram o programa *ROSETTA*, que utiliza uma estrutura hierárquica que permite a utilização de amostras de solos com informações limitadas e detalhadas para estimativa da *CRAS* de solos temperados da Europa e da América do Norte. Em todos esses estudos, as abordagens pontual e paramétrica foram desenvolvidas. Enquanto as saídas dos modelos pontuais correspondem a umidade volumétrica do solo em um valor de sucção prédeterminado, as saídas dos modelos paramétricos correspondem aos parâmetros de um modelo prédefinido, no caso, a equação de van Genuchten (VAN GENUCHTEN, 1980) (isto é,  $\theta$ s,  $\theta$ r,  $\alpha$  e n<sub>v</sub>).

Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012) destacam que as *RNAs* pontuais não fornecem uma curva contínua que permita a determinação da umidade em qualquer sucção (h). As *RNAs* paramétricas contornam esse problema ao fornecer os parâmetros de um modelo na forma de uma equação fechada e, portanto, continua. Entretanto, a forma real das *CRAS* pode não ser semelhante à forma da equação escolhida para todas as amostras de solo. Além disso, é necessária a predeterminação de um modelo de equação. A partir dessas questões, os autores introduziram um novo tipo de abordagem, denominado modelo pseudocontínuo (PC-NN), que fornece uma curva contínua e sem necessidade da utilização de uma equação específica.

O modelo pseudocontínuo consiste na adição do logaritmo natural da sucção ln(h) como parâmetro de entrada da *RNA*. Dessa forma, apenas um neurônio de saída é necessário, correspondente a umidade volumétrica em qualquer sucção ( $\theta_h$ ). A principal vantagem da abordagem é permitir a combinação de conjuntos de dados nos quais a umidade volumétrica foi determinada em diferentes sucções, resultando em um banco de dados útil maior (MOREIRA DE MELO; PEDROLO, 2015). Dessa forma, mesmo com um número limitado de amostras, todos os pontos de  $\theta$  medidos em laboratório podem ser utilizados e não somente os pontos de  $\theta$  comuns a todos as amostras, como na abordagem pontual. A Figura 11 mostra as diferenças entre as topologias típicas utilizadas.





b) Modelo Paramétrico

Vereecken e outros (2010) mostram que as *PTFs* pontuais tendem a apresentar melhores previsões do que as *PTFs* paramétricas. Essa conclusão é vista nos trabalhos de Schaap e Bouten (1996) e Borgesen e Schaap (2005) para solos predominantemente grossos da Holanda e da Dinamarca, respectivamente. Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012) apresentam melhor desempenho para o seu modelo *PC* em relação às outras duas topologias. Moreira De Melo e Pedrollo (2015) comparam o modelo *PC* com modelo pontual que utiliza, ao invés de medições de campo ou laboratório, dados ajustados pela equação de van Genuchten (1980). Também utilizando solos do UNSODA (SCHAAP; LEIJ; VAN GENUCHTEN, 2001), a pesquisa mostra o potencial da utilização desses dados ajustados na previsão da *CRAS* e destaca a possibilidade da identificação dos parâmetros de entrada mais importantes, não possível de ser realizada no modelo *PC*.

Fonte: Autor (2020)

A Tabela 4 mostra um resumo das características dos modelos de *RNAs* encontrados na literatura, como a topologia utilizada e os parâmetros de entrada e saída escolhidos. Em relação às entradas dos modelos, a densidade do solo (BD) é o único parâmetro comum a todas as pesquisas. A distribuição granulométrica também é utilizada em todas as pesquisas mas de diferentes formas: como pontos da curva granulométrica relativos ao percentual em massa das frações do solo de diferentes tamanhos (PSD) ou relativos apenas às porcentagens de partículas de tamanho areia, silte e argila (%SSC); na forma da média (dg) e do desvio padrão ( $\sigma_g$ ) do diâmetro das partículas (MINASNY; MCBRATNEY; BRISTOW, 1999). Schaap e Bouten (1996) sugerem que a simplificação da curva de distribuição granulométrica em frações de areia, silte e argila não é a abordagem mais precisa e utilizam a média do tamanho das partículas (dg) e a uniformidade da curva granulométrica (n<sub>psd</sub>) como parâmetros de entrada. Borgesen e Schaap (2005), entretanto, mostram que a simplificação é razoável, e apresenta resultados semelhantes utilizando 3 ou 7 pontos da curva de distribuição granulométrica.

Todos os estudos estimam a *CRAS* limite de secagem. O trabalho de Pham e outros (2019) é o único a levar em consideração a histerese da *CRAS* em seus resultados a partir da utilização de dados experimentais de *CRAS* de secagem e de umedecimento para o seu banco de dados.

Outros parâmetros empregados incluem o teor de carbono orgânico (CO) ou matéria orgânica (MO), a densidade dos sólidos (PD), a porosidade total do solo (n), a porcentagem de pedregulho (%G), o teor de umidade saturado ( $\theta_{sat}$ ), pontos medidos da curva de retenção ( $\theta_h$ ), a trajetória da curva (drenagem ou umedecimento) e a profundidade do solo (superfície ou subsolo).

D. f	M. J.L.	Entradas							G (1	
Kelerencia	Niodelo	PSD*	%SSC*	BD*	PD*	MO*	n*	ln(h)*	Outros	- Saldas
Pachepsky, Timlin e Varallyay	Pontual	V		v						θ <sub>0, 0.1, 0.3, 1, 2, 5, 25</sub> e 160 kPa
(1996)	Paramétrico	Λ	-	Λ	-	-	-	-	-	$\theta r$ , loga e n <sub>vg</sub>
Schaap e Bouten (1996)	Pontual	x	_	x	_	x	_	_	$\theta_{sat}^*$ e %G*	θ0.35, 0.75, 1.3, 2, 3, 4, 6, 9 e 15 kPa
	Paramétrico			21					$G, d_g^*, n_{psd}^*$ e $\theta s$	$\theta s, \theta r, \alpha e n_{vg}$
Minasny, McBratney e Bristow	Pontual	v	-	Х	-	-			$\ln(d) \ln(\sigma)$	θ <sub>10, 33 e 1500 kPa</sub>
(1999)	Paramétrico	Λ					-	-	$\operatorname{III}(\operatorname{d}_{\mathrm{g}}), \operatorname{III}(\operatorname{O}_{\mathrm{g}})$	$\theta s, \theta r, \alpha e n_{vg}$
Schaap, Leij e van Genuchten (2001)	Paramétrico	-	Х	Х	-	-	-	-	$\theta_3 \; e \; \theta_{1500 \; kPa}$	$\theta s, \theta r, \alpha e n_{vg}$
Borgesen e Schaap (2005)	Pontual	X	Х	Х	_	Х	_		Profundidade	θ1, 10, 100 e 1500 kPa
	Paramétrico								θ <sub>0.1, 10, 100 e 1500</sub> kPa	$\theta s, \theta r, \alpha e n_{vg}$
	Pontual	_			-	Х	-	-		θ5, 33, 100, 500 e 1500 kPa
(2012)	Paramétrico	- X		Х					-	$\theta s, \theta r, \alpha e n_{vg}$
	Pseudocontínuo							Х		$\theta_{h}$
Haghverdi, Ozturk e Cornelis (2014)	Pseudocontínuo	-	Х	Х	-	Х	-	Х	-	$\theta_{h}$
Moreira De Melo e Pedrollo (2015)	Pontual	-	Х	X	Х	-	Х	-	-	θ0, 1, 2, 3, 5, 10, 20, 50, 100 kPa
	Pseudocontínuo	-						Х		$\theta_h$
Nguyen e outros (2017)	Pontual		X	Х	_	X	_	-	_	θ1, 3, 6, 10, 20, 34, 100 e 1500 kPa
	Pseudocontínuo							X		$\theta_{h}$
Pham e outros (2019)	Pseudocontínuo	-	X	Χ	X	-	X	X	Trajetória	$\theta_h$

Tabela 4 - Parâmetros de entrada comumente utilizados para as RNAs da literatura para estimativa da CRAS

\*PSD: pontos da curva granulométrica; %SSC: frações do solo de tamanho areia, argila e silte; BD: densidade aparente seca do solo; PD: densidade dos sólidos; MO: teor de matéria orgânica; n: porosidade total; h: sucção; %G: fração de pedregulho da amostra; d<sub>g</sub>: média do tamanho das partículas ; n<sub>psd</sub>: parâmetro de uniformidade da curva granulométrica,  $\theta_{sat}$ : umidade volumétrica saturada. A Tabela 5 relaciona o número de amostras, o domínio geográfico, os tipos de solo (quando disponíveis) e os valores médios de algumas propriedades físicas do solo para cada pesquisa. A maioria dos estudos é desenvolvido para solos temperados na Europa e América do Norte, devido, principalmente, à disponibilidade de bancos de dados para esses solos, mas falham em fornecer informações sobre a origem desses solos. O estudo de Nguyen e outros (2017) estuda solos tropicais do Vietnã, em sua maioria, de origem aluvial, incluindo neossolos flúvicos e quarzarênicos, luvissolos, argissolos e plintossolos. É de se destacar a maior média de fração argila dentre todos os trabalhos.

Tabela 5 – Domínio geográfico e características de solos utilizados para o desenvolvimento de *RNAs* na estimativa da *CRAS* 

D - f	n * Soloa		D <b>!</b> ? .	Argila	Silte	Areia	BD*
Kelerencia	n <sub>a</sub> ~	50105	Regiao		(%)		(g.cm <sup>-3</sup> )
Pachepsky, Timlin e Varallyay (1996)	230	-	Hungria	-	-	-	-
Schaap e Bouten (1996)	204	Sandy Forest Soils (Éolicos, Aluviais e Glaciais)	Países Baixos	-	-	-	1.41
Minasny, McBratney e Bristow (1999)	842	-	Austrália	27.4	18.1	54.5	1.43
Schaap, Leij e Van Genuchten (2001)	2134	-	Europa e América do Norte	-	-	-	-
Borgesen e Schaap (2005)	3226	-	Dinamarca	11.3	16.7	72.0	1.56
Haghverdi, Cornelis e - Ghahraman (2012) -	122	-	Irã	22.3	38.9	38.8	1.40
	622	-	Austrália	21.1	35.0	43.9	1.46
	150	-	Australia	18.8	28.5	52.6	1.45
Haghverdi, Ozturk e	135	-	Bélgica	34.4	30.4	35.1	1.25
Cornelis (2014)	69	-	Turquia	14.2	31.1	54.7	1.47
Moreira de Melo e Pedrollo (2015)	228	-	Europa e América do Norte	32.8	40.8	26.3	1.41
Nguyen e outros (2017)	189	Neossolos flúvicos e quarzarênicos, luvissolos, argissolos e plintossolos (Aluviais)	Vietnã	44.3	40.1	15.6	1.25
Pham e outros (2019)	218	-	Europa e América do Norte	15.6	22.2	61.6	1.47

\*n<sub>a</sub>: número de amostras de solo; BD: densidade aparente seca do solo

Finalmente, a Tabela 6 traz um resumo das principais características inerentes a metodologia de treinamento das *RNAs*, como o número de neurônios na camada escondida, a divisão dos dados entre os conjuntos de treinamento, validação e teste, os parâmetros estatísticos de avaliação de desempenho e a função de ativação utilizada. Alguns desses trabalhos apresentam informações incompletas sobre os modelos desenvolvidos.

		Divisão dos Dados		Nourônios	Dorômotro	Eunoão do	
Referência	Modelo	Treinamento e Validação	Teste	escondidos	Estatístico	Ativação	
Pachepsky,	Pontual	1000/	00/	7	DMCE	Lagística	
Varallyay (1996)	Paramétrico	100%	0%	4	KMSE	Logistica	
Schaap e Bouten	Pontual	640/	260/	1 - 10	DMSE - MAE	Logístico	
(1996)	Paramétrico	04%	30%	1 a 10	RMSE e MAE	Logistica	
Minasny,	Pontual	970/	120/	1.7		Tangente	
Bristow (1999)	Paramétrico	8/%	13%	1 a /	RMSE e AIC	Hiperbólica	
Schaap, Leij e Van Genuchten (2001)	Paramétrico	67%	33%	-	RMSE, MAE e r <sup>2</sup>	-	
Borgesen e Schaap (2005)	Pontual Paramétrico	63%	37%	6	RMSE e AIC	-	
Haghverdi,	Pontual		20%				
Cornelis e Ghahraman	Paramétrico	80%		-	r, RMSE e MAE	-	
(2012)	Pseudocontínuo	-			WIAL		
Haghverdi, Ozturk e Cornelis (2014)	Pseudocontínuo	80%	20%	1 a 15	r, RMSE e MAE	Tangente Hiperbólica	
Moreira de Melo	Pontual	710/	2004		RMSE, r <sup>2</sup> e	Logístico	
e Pedrollo (2015)	Pseudocontínuo	/1%	29%	-	GMER	Logistica	
Nguyen e outros (2017)	Pontual	63%	37%	1 a 20	MAE, RMSE e r <sup>2</sup>	Tangente Hiperbólica	
Pham e outros $(2019)$	Pseudocontínuo	80%	20%	9 a 54	RMSE e r <sup>2</sup>	Tangente sigmóide	

Tabela 6 - Características inerentes a metodologia das RNAs da literatura para estimativa da CRAS

RMSE: raiz do erro quadrático médio; r: coeficiente de Pearson; r<sup>2</sup>: coeficiente de determinação; MSE: erro quadrático médio; MAE: erro absoluto médio; GMER: erro médio geométrico; AIC: critério de Akaike.

A separação de pelo menos 20% dos dados para a etapa de teste é comum para a maior parte dos estudos. Nesta etapa, os pesos sinápticos são aplicados a um conjunto diferente de dados do qual foi realizado o ajuste. A maioria dos trabalhos utiliza apenas uma camada escondida e o número de neurônios escondidos variando entre 1 e 54 neurônios. O estudo de Pham e outros (2019) é o

único a apresentar um modelo com três camadas escondidas para o qual melhores estimativas são obtidas em relação ao modelo de apenas uma camada escondida. Assim, o trabalho evidencia a influência da estrutura e da forma de distribuição dos neurônios na capacidade de previsão das *RNAs*.

O *RMSE* se mostra como um parâmetro estatístico comum a todos os trabalhos na avaliação da performance das *RNAs*. Ele está geralmente associado a outros parâmetros estatísticos, tais como o r e o  $r^2$ , citados anteriormente, além de parâmetros como o erro quadrático médio (MSE), o erro absoluto médio (MAE), o erro médio geométrico (GMER) e o critério de Akaike (AIC). As funções de ativação utilizadas são da família sigmoide: tangente sigmoide (tansig), tangente hiperbólica (tanh) e a função logística (logsig). O algoritmo de treinamento Levenberg-Marquardt (LM) foi utilizado em todas as pesquisas.

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left| \theta_{i,lab} - \theta_{i,est} \right|$$
(15)

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left( \theta_{i,lab} - \theta_{i,est} \right)^2 \tag{16}$$

$$GMER = exp\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{n}ln\left(\frac{\theta_{i,est}}{\theta_{i,lab}}\right)\right]$$
(17)

$$AIC = N * ln\left(\sum_{i=1}^{N} \left(\theta_{i,lab} - \theta_{i,est}\right)^{2}\right) + 2 * P$$
(18)

onde N: número total de exemplos apresentados a um modelo e P: número total de pesos sinápticos de um modelo.

As *RNAs* são capazes de assumir qualquer relação entre parâmetros sem considerar, *a priori*, uma suposição ou modelo. Por outro lado, os modelos gerados são "caixas pretas", devido à dificuldade de análise dos seus parâmetros (BARROS; VAN LIER, 2014). Nguyen e outros (2017) adicionam como desafios para a implementação das *RNAs* fatores como a susceptibilidade ao *overfitting*, a alta demanda de dados e a necessidade de conhecimento especializado para sua utilização e aplicação.

# 3. MATERIAIS E MÉTODOS

Neste capítulo é apresentado e caracterizado o banco de dados hidrofísicos de solos do Brasil denominado *HYBRAS* (*Hydrophysical Database for Brazilian Soils*), utilizado neste estudo. Em seguida, a metodologia para o desenvolvimento e treinamento das RNAs é descrita a partir da ferramenta computacional utilizada e da descrição das características dos modelos criados. Duas abordagens são propostas: a abordagem pontual, capaz de estimar pontos da *CRAS* em sucções prédefinidas; e a abordagem pseudocontínua, capaz de estimar a *CRAS* para qualquer valor de sucção, o que permite a obtenção da *CRAS* praticamente contínua pela discretização de vários pontos.

#### 3.1 Banco de Dados HYBRAS (OTTONI et al., 2018, 2019)

O presente estudo faz uso do banco de dados hidrofísicos de solos no Brasil denominado *HYBRAS* 1.0. O *HYBRAS* é uma iniciativa do Departamento de Hidrologia do Serviço Geológico do Brasil (CPRM, Companhia de Pesquisa de Recursos Minerais), com o suporte da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ). Criado com o objetivo de prover dados hidro físicos consistentes e de boa qualidade para o desenvolvimento de *PTFs* para solos brasileiros, o *HYBRAS* possui dados de retenção de água e de condutividade hidráulica saturada (K<sub>sat</sub>), associados aos atributos básicos do solo (propriedades físicas) e aos métodos de determinação dessas propriedades.

A partir da coleta de informações de publicações de todo o país, o *HYBRAS* compilou informações de amostras de uma variedade de solos brasileiros de ambiente tropical e subtropical. As publicações de origem são listadas no trabalho de Ottoni e outros (2018). A seleção das amostras levou em consideração alguns critérios, tais como:

- A disponibilidade conjunta de informações de textura, densidade aparente seca do solo (BD) e dados de retenção hídrica em ampla faixa de sucção (0 a 1500 kPa).
- Amostras ensaiadas em laboratório sob a condição indeformada para medições dos dados de retenção de água;

- Amostras com medições de pelo menos cinco pontos da *CRAS*, sendo essas medições realizadas por métodos onde a pressão de água e a umidade da amostra fossem diretamente mensuradas;
- Amostras com medições bem distribuídas ao longo da faixa de sucção: um ponto para a condição de saturação (a umidade de saturação ou a porosidade total), três pontos dentro dos intervalos de sucção 3 a 8 kPa, 25 a 50 kPa e 900 a 1500 kPa, e um quinto ponto, que não deveria se incluir em nenhuma das faixas acima. Não houve restrições quanto a sucção de demais pontos da curva;

A partir dos critérios estabelecidos, são apresentadas informações de propriedades hidrofísicas de 1075 amostras espalhadas pelo território brasileiro, abrangendo as cinco regiões do Brasil. A base de dados do *HYBRAS* foi desenvolvida no *Microsoft Access* e organizada em tabelas, o que possibilita a associação de todas as informações de cada amostra de solo. Na tabela GENERAL, estão armazenadas as informações gerais de cada amostra, como localização, classificação pedológica e publicação de referência. Atributos físicos das amostras são armazenados na tabela SOIL\_PROPS, enquanto os dados de teor volumétrico de água ( $\theta$ ) para diferentes valores de sucção (h) são armazenados na tabela RAWRET. Os detalhes dos métodos de determinação de cada propriedade são apresentados nas tabelas KSAT\_METHOD, TEXTURAL\_METHOD, DENSITY\_METHOD, CHEMICAL\_METHOD e WR\_METHOD.

# 3.1.1 Descrição dos Dados Investigados

Do banco de dados *HYBRAS*, 565 amostras foram selecionadas para investigação. O critério de seleção das amostras levou em consideração a disponibilidade conjunta de informações de textura (isto é, % de partículas de tamanho areia, silte e argila, sempre totalizando 100%), densidade aparente seca do solo (BD), densidade dos sólidos (PD), porosidade total (n) e teor de matéria orgânica (MO), utilizadas como parâmetro de entrada para as *RNAs* desenvolvidas; e dados de umidade volumétrica ( $\theta$ ) medidos, pelo menos, nas seguintes sucções (h, e tomadas como positivas): 0, 6, 10, 33, 100 e 1500 kPa, utilizados como parâmetros de saída. Essas sucções foram escolhidas pela maior disponibilidade de pontos experimentais medidos e de forma a representar a curva em uma ampla faixa de sucção.

A localização geográfica das amostras e o número de amostras por estado são mostrados na Figura 12, com destaque para a maior quantidade de dados para os estados do Rio Grande do Sul e Rio de Janeiro. As 565 amostras investigadas abrangem 9 dos 26 Estados brasileiros (Amazonas, Bahia, Espírito Santo, Maranhão, Minas Gerais, Pará, Rio de Janeiro, Rio Grande do Sul e São Paulo) e 4 das 5 regiões do país (exceção ao Centro-Oeste).



Figura 12 - Localização geográfica das 565 amostras de solo do HYBRAS investigadas

Fonte: Autor (2020)

Os principais grupos dentro do banco de dados investigado correspondem a Planossolos (192 amostras), Latossolos (126 amostras) e Argissolos (94 amostras). Os dois últimos grupos são representativos de ambientes tropicais intemperizados, predominantes no Brasil e correspondendo a 60% do território brasileiro (OTTONI *et al.*, 2014). Os solos restantes também incluem Gleissolos (71), Cambissolos (49), Chernossolos (19), Organossolos (8) e Nitossolos (6). Informação disponível somente para 158 das 565 amostras, os valores de condutividade hidráulica saturada

 $(K_{sat})$  variam entre 1.3 a 2989.0 cm.d<sup>-1</sup>. Para o banco de dados completo, Ottoni e outros (2018) destacam o elevado valor médio para a classe textural Argila ( $K_{sat} = 65 \text{ cm.d}^{-1}$ ), valor superior a faixa usual de  $K_{sat}$  de 2 a 5 cm.d<sup>-1</sup> para os solos argilosos de clima temperado.

Os pontos experimentais foram obtidos, em sua maioria, pelos métodos da mesa de tensão (da saturação até 6 kPa), e da placa porosa em câmara de pressão para sucções superiores (até 1500 kPa). Os ensaios foram realizados em amostras indeformadas e inicialmente saturadas, correspondendo à CRAS limite superior de secagem desses solos. A distribuição granulométrica obedece às faixas limites da *USDA* (*United States Department of Agriculture*) (argila < 0.002 mm, silte 0.002 - 0.05 mm, e areia 0.05 - 2 mm). O carbono orgânico (CO) para a maior parte das amostras foi determinado pelo método Walkley-Black (1934) com determinação por titulação e a matéria orgânica (MO) foi calculada a partir do CO multiplicado por 1.724. A densidade aparente seca do solo (BD) foi determinada pelo método do anel volumétrico. A densidade dos sólidos (PD) foi predominantemente determinada pelos métodos do balão volumétrico e do picnômetro. A porosidade total (n) foi calculada a partir dos valores de *BD* e *PD* de cada amostra, conforme Equação 19:

$$n = 1 - \frac{BD}{PD} \tag{19}$$

A Figura 13 apresenta a distribuição das amostras no triângulo textural USDA. Das 12 classes texturais da USDA, 11 são representadas pelo banco de dados investigado (exceção da classe Silte). Os solos ocupam majoritariamente a faixa central e o lado esquerdo do triângulo. As classes de solo Franco e Argila abrangem aproximadamente 65% do total de amostras de solo. A ausência de solos com altas porcentagens de silte (> 60%) é observada no banco de dados investigado, o que é uma representação textural típica de solos intemperizados (OTTONI *et al.*, 2019). De fato, a predominância de partículas muito grossas e muitos finas sobre partículas de tamanhos intermediários torna a estrutura do solo um fator importante para descrição das propriedades hidráulicas de solos brasileiros de clima tropical (TOMASELLA *et al.*, 2003).



Figura 13 - Classificação textural e distribuição das 565 amostras investigadas do HYBRAS no triângulo textural

Fonte: Autor (2020)

A Tabela 7 apresenta o resumo estatístico das propriedades de entrada e saída a serem utilizadas na construção dos modelos e a Figura 14 mostra o histograma da distribuição de valores. As amostras de solo selecionadas cobrem uma grande variedade de tipos e características de solos. Solos com elevado teor de matéria orgânica (> 6%) e baixa densidade (< 0,8 g.cm<sup>-3</sup>) apresentam baixa representatividade, sendo essas duas propriedades diretamente relacionadas (amostras com valores baixos de BD estão associadas a valores elevados de matéria orgânica).

Propriedades do Solo	Mínimo	Máximo	Média	Desvio Padrão						
Parâmetros de Entrada										
Argila (%)	2.0	96.0	33.4	21.4						
Silte (%)	1.0	63.6	25.6	14.4						
Areia (%)	0.4	93.0	40.9	19.4						
<b>BD</b> (g.cm <sup>-3</sup> )	0.26	2.01	1.42	0.30						
<b>PD</b> (g.cm <sup>-3</sup> )	1.67	3.67	2.57	0.22						
Porosidade Total (n)	0.237	0.866	0.446	0.122						
MO (%)	0.08	40.30	2.26	3.11						
	Parâmet	ros de Saída	a							
θ0 kPa (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )	0.231	0.866	0.461	0.110						
θ6 kPa (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )	0.087	0.748	0.348	0.084						
θ10 kPa (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )	0.028	0.722	0.320	0.095						
θ33 kPa (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )	0.023	0.679	0.291	0.093						
θ100 kPa (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )	0.015	0.636	0.266	0.092						
θ1500 kPa (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )	0.006	0.533	0.223	0.087						

Tabela 7 - Resumo estatístico das características hidrofísicas dos solos investigados

Figura 14 – Histograma das propriedades dos solos investigados do HYBRAS: (a) %argila, (b) %silte, (c) %areia, (d) densidade aparente seca do solo, (e) densidade dos sólidos, (f) porosidade total, (g) Teor de Matéria Orgânica.



Fonte: Autor (2020)

A Tabela 8 mostra a distribuição das 565 amostras de solo investigadas segundo a classificação textural e os valores médios de algumas propriedades físicas e hidráulicas para cada classe textural. Em geral, as classes texturais de solos com maior quantidade de finos (isto é, fração de solo de tamanho silte e argila) são capazes de reter maior quantidade de água em qualquer valor de sucção (h), e as classes texturais com predominância da fração grossa apresentam as maiores médias em relação a densidade aparente seca do solo (BD). Dessa forma, as classes texturais Areia e Areia Franca apresentam as médias mais baixas de  $\theta$  tanto na região de saturação da *CRAS* ( $\theta_0$  kPa), quanto na região residual ( $\theta_{1500 \text{ kPa}}$ ). Por outro lado, as classes texturais Franco Argilo-Siltosa e Argila Siltosa, com a maior média de finos no solo, apresentam as médias relativamente mais altas para  $\theta$  ao longo de toda a curva. A Figura 15 mostra graficamente os pontos experimentais para todos os solos dentro de cada classe textural, evidenciando a grande amplitude de valores.

Destaca-se a pequena representatividade de pontos medidos na faixa de sucção entre 0.1 e 6 kPa, o que dificulta a definição e um estudo quantitativo do valor de entrada de ar (AEV) para a maior parte das amostras de solo do *HYBRAS*.

Classifian a Transformal	*	Argila	Silte	Areia	BD*	MO*	θ0 kPa	θ6 kPa	θ33 kPa	θ1500 kPa
	n <sub>a</sub> ~	(%)		(g.cm <sup>-3</sup> )	(%)	(cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )				
Areia	9	3.8	5.1	91.1	1.74	0.80	0.356	0.108	0.043	0.017
Areia Franca	3	9.7	6.3	84.0	1.67	1.20	0.373	0.146	0.095	0.057
Franco Arenoso	32	14.2	19.5	66.3	1.61	1.60	0.372	0.287	0.224	0.145
Franco	201	15.2	39.0	45.9	1.61	2.30	0.404	0.325	0.266	0.191
Franco Argilo-Arenosa	68	27.6	10.7	61.7	1.55	1.90	0.391	0.303	0.228	0.165
Franco Argilo-Siltosa	8	34.3	53.6	12.1	0.90	7.50	0.638	0.459	0.405	0.298
Franco Siltoso	1	26.0	51.5	22.5	0.43	22.1	0.735	0.540	0.424	0.236
Franco Argiloso	25	31.9	35.7	32.4	1.14	5.70	0.546	0.438	0.393	0.308
Argila Arenosa	38	40.2	9.1	50.7	1.46	1.10	0.426	0.330	0.263	0.199
Argila Siltosa	15	45.3	46.3	8.4	1.08	3.00	0.595	0.424	0.389	0.317
Argila	165	61.4	17.1	21.5	1.16	2.00	0.559	0.400	0.354	0.294

Tabela 8 - Valores médios de dados hidrofísicos do HYBRAS para várias classes texturais.

\*n<sub>a</sub>: número de amostras; BD: densidade aparente seca do solo; MO: teor de matéria orgânica.



Figura 15 – Pares experimentais ( $\theta$ ,h) para cada classe textural

Fonte: Autor (2020)

#### **3.2 Ferramenta Computacional**

O treinamento de *RNAs* nesta pesquisa fará uso do software computacional *MatLab*, que permite a criação de diferentes modelos de *RNAs* por meio de interfaces gráficas de fácil utilização: o *nftool* e o *nntool*. Um passo a passo para a utilização dessas interfaces pode ser encontrada no trabalho de Oliveira Filho (2019).

O *nftool* realiza o treinamento de redes *feed-forward* a partir do uso de um conjunto de entradas e de saídas previamente organizados pelo usuário e permite a escolha das porcentagens de divisão nos conjunto de treinamento, validação e teste, do número de neurônios na camada escondida e do algoritmo de treinamento, tendo disponíveis os algoritmos *Levenberg-Marquardt*, *Bayesian Regulatization* e *Scaled Conjugate Gradient*. A função de ativação padrão é a função tangente sigmoide (*tansig*). A técnica de parada antecipada (*early stopping technique*) é utilizada e interrompe o treinamento quando o erro do conjunto de validação cresce.

A entrada de dados é realizada por meio de duas matrizes: uma matriz com os valores de entrada (*input*) e uma com os valores de saída (*target*). Para ambas, cada coluna representa uma amostra de solo. Cada linha da matriz de entrada representa um dos parâmetros de entrada e cada linha da matriz de saída representa um dos parâmetros de saída.

O treinamento das redes pode ser repetido diversas vezes. Durante o treinamento, o progresso para os três conjuntos é atualizado constantemente na janela de treinamento, conforme Figura 16. O erro é avaliado pelo erro quadrático médio (MSE), definido pela Equação 20:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (e_i)^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\theta_{i,obs} - \theta_{i,est})^2$$
(20)



Figura 16 - Telas da interface nftool após o treinamento de uma RNA

Fonte: Autor (2020)

Para o exemplo da Figura 16, o conjunto de dados foi apresentado 10 vezes para o modelo (*iterations*), mas a partir da iteração 4, apesar da diminuição do *MSE* para os conjuntos de treinamento e de teste, os erros aumentam para o conjunto de validação. A magnitude do gradiente (*Gradient*) e o número de verificações de validação (*Validation checks*) são usados como critério para finalizar o treinamento. O gradiente se tornará muito pequeno à medida que o treinamento atingir um mínimo da função desempenho. Se a magnitude do gradiente for menor que o mínimo estipulado (no caso, 1 x  $10^{-7}$  padrão), o treinamento é interrompido. O número de verificações de validação representa o número de iterações sucessivas que o desempenho da validação falha em diminuir. Se esse número atingir 6 (o valor padrão), o treinamento é interrompido e os pesos e conexões no mínimo do erro de validação são retornados. Neste exemplo, o treinamento foi interrompido devido ao número de verificações de validação.

Alternativamente, o *nntool* também é utilizado, pois apresenta possibilidades adicionais de escolhas, como a quantidade de camadas escondidas, a função de treinamento de cada camada (*logsig, tansig* ou *purelin*), uma série de algoritmos de treinamento e variações nos parâmetros internos das *RNAs*, como o valor inicial dos pesos de conexões. Para o treinamento de *RNAs* com mais de uma camada escondida, optou-se pela entrada de dados via comando, conforme Anexo A.

Após treinada, o *Matlab* permite a utilização da *RNA* criada para testes adicionais com novos conjuntos de dados, e que o usuário salve as estimativas obtidas.

# 3.3 Modelos Propostos

Na Engenharia Geotécnica, geralmente, a escolha das variáveis de entrada apropriadas para determinado modelo é baseada no conhecimento a priori do problema. No caso da previsão da *CRAS*, as variáveis de comum utilização são as que representam a estrutura do solo, isto é, o tamanho, a forma e a disposição de suas partículas e vazios, tais como: a distribuição granulométrica do solo, a densidade do solo, a densidade dos sólidos e o teor de carbono orgânico ou matéria orgânica, como observado no tópico 2.8.

De modo a determinar as variáveis de entrada do modelo que representem melhor o problema e forneçam melhores resultados, a técnica *stepwise* (MAIER; DANDY, 2000b) é utilizada. A técnica consiste no treinamento individual da rede com cada variável, de modo a selecionar a variável de melhor performance. A partir disso, as outras variáveis de entrada são adicionadas ao modelo uma a uma, e o impacto na capacidade de predição dos modelos é analisado.

Neste trabalho, as variáveis de entrada selecionadas para o modelo inicial (modelo *i*) correspondem às porcentagens de areia, silte e argila (%SSC), representativas da distribuição granulométrica do solo. A partir das 3 variáveis de entrada, foram adicionadas outras 4 variáveis obtidas para as 565 amostras do banco de dados: *BD*, *PD*, *n* e *MO*. Dessa forma, uma estrutura hierárquica é proposta, permitindo a utilização das *RNAs* para amostras de solo com informações limitadas e detalhadas.

As *RNAs* foram desenvolvidas a partir de duas topologias: pontual e pseudocontínua, conforme Figura 17. O primeiro modelo consiste em uma *RNA* do tipo pontual (PT-RNA), contendo seis neurônios de saída, cada um prevendo a umidade volumétrica relacionada a uma sucção préestabelecida conforme Figura 17a (isto é,  $\theta_0$ ,  $\theta_6$ ,  $\theta_{10}$ ,  $\theta_{33}$ ,  $\theta_{100}$  e  $\theta_{1500 \text{ kPa}}$ ). A desvantagem da abordagem pontual é a necessidade que os parâmetros de saída sejam comuns a todas amostras do banco de dados. Dessa forma, esses pontos foram escolhidos por apresentarem a maior quantidade de valores medidos em laboratório dentro do banco de dados, mas de forma a representar a curva
em uma ampla faixa de sucção. No total, 3390 pontos medidos (6 pontos de cada uma das 565 amostras) são utilizados para essa abordagem.



Figura 17 – Modelos de RNAs propostos: (a) modelo pontual (PT-RNA) e (b) modelo pseudocontínuo (PC-RNA)

Fonte: Autor (2020)

O segundo modelo aplicado é análogo à abordagem pseudocontínua (PC-RNAs) introduzida por Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012), exceto pelo uso de diferentes parâmetros de entrada. O método consiste em estimar a umidade volumétrica ( $\theta$ ) na sucção *h* pela adição do logaritmo natural dessa sucção *ln(h)* como parâmetro de entrada, como mostra a Figura 17b. Como consequência, apenas um neurônio de saída é necessário e corresponde a umidade volumétrica medida na sucção *h*,  $\theta_h$ . A utilização de pontos experimentais medidos a qualquer sucção no treinamento das *PC*-*RNAs* é a principal vantagem sobre as *PT-RNAs* – limitadas a estimar os pontos em sucções prédefinidas e comuns a todas as amostras do conjunto. Dessa forma, o número de pontos experimentais total chega a 4034, ou seja, são utilizados 644 pontos experimentais a mais do que na abordagem pontual, restrita aos 6 valores de sucção de cada amostra citados anteriormente.

O impacto na matriz de parâmetros de entrada é que, para cada ponto da *CRAS* medido de uma mesma amostra, todos os outros parâmetros de entrada são repetidos, resultando em um número maior de dados disponíveis para ajustar o mesmo número de saídas. Enquanto as *PT-RNAs* apresentam uma matriz onde cada linha representa uma amostra (565 linhas), cada linha da matriz para as *PC-RNAs* representa um ponto medido em laboratório (4034 linhas).

Os pares de pontos experimentais ( $\theta$ -h) para as 565 amostras de solo investigadas são mostrados na Figura 18. Os seis pontos comuns a todas as 565 amostras, totalizando 3390 pontos experimentais, são utilizados para as duas abordagens propostas, enquanto os pontos experimentais medidos em outras sucções são utilizados apenas para a abordagem pseudocontínua. Assim, são incluídos pontos medidos em diversas sucções (0.1, 1, 2, 4, 8, 20, 50, 70, 75, 200, 300, 500, 800 e 1000 kPa).



Figura 18 – Pares de pontos medidos ( $\theta$ , h) para as 565 amostras de solo investigadas

△ Abordagem Pseudocontínua □ Ambas Abordagens

O resumo das características dos modelos criados é apresentado na Tabela 9. Além da influência dos parâmetros de entrada no desempenho das *RNAs*, a proporção de divisão dos dados entre os conjuntos de treinamento, teste, e validação foi avaliada. Três diferentes proporções foram testadas. Considerando a abordagem de tentativa e erro para otimização da geometria das RNAs, diferentes números de neurônios e de camadas escondidas foram investigados. O número de entradas, saídas e neurônios na camada escondida varia entre as duas abordagens: 3 a 7 entradas, 5 a 40 neurônios escondidos e 1

Fonte: Autor (2020)

saída para a abordagem pseudocontínua. O número de camadas escondidas variou entre 1 e 3. Para ambas topologias, foi utilizada a função de ativação *tansig* para as camadas escondidas e a função linear na camada de saída, o algoritmo de treinamento *Levenberg-Marquardt* e avaliou-se o desempenho pelos parâmetros estatísticos *RMSE* e  $r^2$ . A performance é considerada aceitável quando o *RMSE* é próximo a zero e o  $r^2$  próximo a 1.

Topologia	PT-RNAs	PC-RNAs				
Número de Exemplos Apresentados	565	4034				
Parâmetros de Entrada	3 a 7	3 a 8				
Parâmetros de Saída	6	1				
Número de Neurônios	5 a 40	5 a 120				
Número de Camadas Escondidas	1 a 3					
Divisão dos Dados (%Treinamento/%Validação/%Teste)	70-15-15 / 60-2	0-20 / 80-10-10				
Função de Transferência	Tangente	Sigmóide				
Algoritmo de Treinamento	Levenberg-Marquardt					
Parâmetro Estatístico	RMSE e r <sup>2</sup>					

Tabela 9 - Características das RNAs modeladas

A seleção das amostras entre os três conjuntos (treinamento, validação e teste) foi feita de forma randômica por meio do comando (*dividerandom*) e os dados foram normalizados dentro do intervalo da função *tansig* [-1,1] por meio do comando (*mapminmax*). Em relação ao critério de parada, o treinamento de todas as *RNAs* foi interrompido pelo número de verificações de validação conforme explicado no tópico 3.2.

# 4. ANÁLISE DOS RESULTADOS

Neste capítulo são analisados e discutidos os resultados obtidos a partir do treinamento de *RNAs* para previsão da *CRAS* limite de secagem para as 565 amostras investigadas de solos brasileiros do banco de dados *HYBRAS*. Em um primeiro momento, é realizada uma análise exploratória dos dados de forma a investigar as relações existentes entre as propriedades físicas e hidráulicas das amostras de solo utilizadas. A partir dessa análise, conforme objetivos definidos, são discutidos fatores como a topologia, a estrutura e geometria das *RNAs*, e a influência de adição de parâmetros de entrada no desempenho de *PT-RNAS* e *PC-RNAs*.

O comportamento dos modelos também é analisado em relação a diferentes classes texturais e aos diferentes trechos da *CRAS* limite de secagem. Ainda, um modelo hierárquico é proposto para a utilização de *RNAs* para solos com informações limitadas ou detalhadas de amostras de solos.

# 4.1 Análise Exploratória dos Dados

De forma a encontrar inter-relações entre as propriedades do solo no conjunto de dados utilizados, foi realizada a análise exploratória dos dados. A alta correlação entre os parâmetros de entrada pode ser uma razão para o desempenho inferior de uma *RNA* (PHAM *et al.*, 2019). O coeficiente de Pearson (r) é utilizado para avaliar a correlação entre as variáveis de entrada selecionadas, como mostra a Tabela 10. Quanto mais próximo a 1 (um), mais forte a correlação entre as variáveis.

De acordo com a Tabela 10, apenas um par de entradas apresenta correlação relativamente alta: densidade seca do solo (BD) e porosidade total (n), com r = -0.96. A utilização dessas propriedades concomitantemente nos modelos de *RNAs* será avaliada nesse estudo. A correlação negativa entre *BD* e *MO* (r = -0.55) confirma que solos com maior matéria orgânica terão concomitantemente menor densidade. Os outros pares apresentam valores de *r* relativamente baixos, e, por isso, as propriedades escolhidas podem ser adotadas como parâmetros de entrada.

	% Argila	% Silte	% Areia	BD	PD	n	МО
% Argila	1						
% Silte	-0.47	1			Simátrico		
% Areia	-0.76	-0.22	1		Simetrico		
BD	-0.67	0.07	0.69	1			
PD	0.26	-0.29	-0.07	0.07	1		
n	0.71	-0.15	-0.67	-0.96	0.19	1	
МО	0.00	0.24	-0.18	-0.55	-0.41	0.46	1

Tabela 10 - Avaliação da correlação entre as variáveis de entrada investigadas

O coeficiente de Pearson (r) também é utilizado para avaliar a correlação entre as variáveis de entrada e saída selecionadas, sendo um indicativo das propriedades físicas de entrada de maior influência na umidade volumétrica. A Tabela 11 resume os resultados das correlações entre as variáveis. O teor de argila e de silte, a porosidade total e a matéria orgânica são positivamente correlacionados com o a umidade volumétrica no solo, enquanto o teor de areia, a densidade aparente seca do solo e a densidade dos sólidos são negativamente correlacionados.

Duantiada da da Cala			Sucção	o (kPa)		
Propriedade do Solo	θο	θ6	θ10	θ33	θ100	θ1500
Argila (%)	0.63	0.51	0.48	0.52	0.57	0.63
Silte (%)	0.03	0.20	0.27	0.22	0.18	0.11
Areia (%)	-0.72	-0.71	-0.73	-0.75	-0.76	-0.78
<b>BD</b> (g.cm <sup>-3</sup> )	-0.94	-0.72	-0.73	-0.73	-0.75	-0.69
<b>PD</b> (g.cm <sup>-3</sup> )	0.13	-0.19	-0.18	-0.17	-0.14	-0.07
Porosidade Total (n)	0.95	0.66	0.67	0.67	0.69	0.66
MO (%)	0.49	0.49	0.45	0.43	0.41	0.32

Tabela 11 - Matriz de correlação entre as propriedades de entrada e saída

De acordo com os valores de *r* obtidos, a densidade aparente seca do solo (BD) e a porosidade total (n) apresentam alta correlação com  $\theta_0$  (r = -0.94 e 0.95, respectivamente). Apenas para parte das amostras de solo do *HYBRAS*, o valor de  $\theta_0$  é um valor medido em laboratório. Na ausência do valor de ensaio,  $\theta_0$  foi tomado como igual a *n*, uma vez que, quando saturado (isto é, S = 100% e  $\theta = \theta_0$ ), a umidade volumétrica ( $\theta$ ) é igual a porosidade do solo (n), sendo igual a porosidade do solo, conforme Equação 17:

$$\theta = n.S \therefore para S = 100\%, \quad \theta = \theta_0 = n$$
 (17)

Com relação aos demais pontos utilizados como parâmetros de saída, as variáveis *BD*, *n* e fração de areia apresentam valores razoavelmente altos para o coeficiente *r*, indicando maior influência dessas propriedades nos valores de  $\theta$ .

No geral, as correlações de *BD* e  $n \operatorname{com} \theta$  são relativamente mais fortes para baixos valores de sucção e decrescem para sucções mais altas. É esperado que essas propriedades, representativas da estrutura do solo, afetem o comportamento hidráulico do solo na porção saturada da *CRAS* (RAWLS; GISH; BRAKENSIEK, 1991; MERMOUD; XU, 2006; WEYNANTS; VEREECKEN; JAVAUX, 2009). À medida que o solo seca, a adsorção de água se torna crítica e as propriedades do solo que afetam a superfície específica tornam-se importantes, como a textura (particularmente o teor de argila e a mineralogia) (MANRIQUE; JONES; DYKE, 1991). Assim, é observado o crescimento da correlação entre as frações de Argila e Areia com as sucções mais elevadas.

A força da correlação entre os parâmetros de entrada e saída indica a ordem de importância para adição de propriedades físicas do solo ao modelo inicial, baseado apenas na distribuição granulométrica (%SSC). Dessa forma, *BD* e *n* são as propriedades que melhor explicam a variação de umidade volumétrica dos solos, enquanto *PD* é a propriedade de menor influência. Baseado nessa informações e a partir do método *stepwise*, 14 modelos com diferentes combinações de parâmetros de entrada são analisados, conforme a Tabela 12.

O modelo inicial (*i*) utiliza apenas informações de textura do solo como parâmetros de entrada (%SSC). A partir desse modelo, as demais propriedades de entrada investigadas (n, BD, PD e MO) são adicionadas: os modelos *ii-v* adicionam uma dessas propriedades ao modelo inicial; os modelos *vi-viii* adicionam duas, sendo uma delas a porosidade total do solo (n); os modelos *x-xiii* acrescentam três; e o modelo *xiv* utiliza todas as propriedades de entrada investigadas. Considerando que a porosidade total (n) é calculada a partir de *BD* e *PD*, o modelo *ix* avalia se a utilização dessas propriedades concomitantemente tem influência na capacidade de estimativa das *RNAs*. Embora apresentem baixas correlações com os parâmetros de saída, acredita-se que a utilização de *PD* e de *MO* com *BD* pode ser útil para estimativa da *CRAS*.

Madala	E	ntradas
Modelo	PT-RNAs	PC-RNAs
i	%SSC	%SSC, ln(h)
ii	%SSC, MO	%SSC, MO, ln(h)
iii	%SSC, PD	%SSC, PD, ln(h)
iv	%SSC, BD	%SSC, BD, ln(h)
v	%SSC, n	%SSC, n, ln(h)
vi	%SSC, n, MO	%SSC, n, MO, ln(h)
vii	%SSC, n, BD	%SSC, n, BD, ln(h)
viii	%SSC, n, PD	%SSC, n, PD, ln(h)
ix	%SSC, BD, PD	%SSC, BD, PD, ln(h)
х	%SSC, PD, n, MO	%SSC, PD, n, MO, ln(h)
xi	%SSC, BD, PD, n	%SSC, BD, PD, n, ln(h)
xii	%SSC, BD, n, MO	%SSC, BD, n, MO, ln(h)
xiii	%SSC, BD, PD, MO	%SSC, BD, PD, MO, ln(h)
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO	%SSC, BD, PD, n, MO, ln(h)

Tabela 12 - Diferentes combinações de parâmetros de entrada para os modelos investigados

%SSC: frações de partículas de tamanho areia, silte e argila; BD: densidade aparente seca do solo; PD: densidade dos sólidos; MO: teor de matéria orgânica; ln(h): logaritmo natural da sucção.

# 4.2 Influência da Proporção de Dados nos Conjuntos de Treinamento, Validação e Teste

O modelo *xiv* foi utilizado para avaliar a influência da proporção de dados dentro dos conjuntos de treinamento, validação e teste. O modelo padrão no *nftool* utiliza 70% dos dados para treinamento e ajuste dos pesos sinápticos, 15% para o conjunto de validação, utilizado como critério de parada, e 15% para o conjunto independente de teste, utilizado para a aplicação dos pesos sinápticos a dados desconhecidos. Três diferentes proporções são investigadas como mostra a Figura 19 para a abordagem pontual e a Figura 20 para a abordagem pseudocontínua. O código apresenta três números que representam a porcentagem de dados utilizados no treinamento, validação e teste, respectivamente.

A análise das Figuras 19 e 20 indica que não existe uma relação clara entre a proporção de dados utilizados para treinamento, teste e validação e o desempenho do modelo, corroborando com o estudo de Shahin, Maier e Jaksa (2005). A utilização de maior proporção de dados no conjunto de treinamento (Figs. 19b e 20b) ou no conjunto de teste (Figs. 19c e 20c) não está diretamente

associada à redução do erro para o conjunto. Os resultados indicam, portanto, que pode haver variação nos resultados obtidos dependendo da proporção utilizada. Entretanto, essa variação não está relacionada ao número de exemplos do conjunto mas à dificuldade de representabilidade de todo o banco de dados utilizado dentro dos três conjuntos. Dessa forma, a proporção padrão (70-15-15) é utilizada para as análises deste estudo.



Figura 19 – Desempenho do modelo *xiv* para diferentes proporções de dados entre os conjuntos (a) Total (b) Treinamento e (c) Teste

Fonte: Autor (2020)

Figura 20 – Desempenho do modelo *xiv* para diferentes proporções de dados entre os conjuntos (a) Total (b) Treinamento e (c) Teste



Fonte: Autor (2020)

#### 4.3 Modelo Pontual (PT-RNAs)

## 4.3.1 Influência dos Parâmetros de Entrada e do Número de Neurônios na Camada Escondida

De forma a avaliar a influência da adição de parâmetros de entrada e do número de neurônios na camada escondida, o *RMSE* e o  $r^2$  de 14 modelos de *RNAs* são apresentados para todo o banco de dados investigados na Tabela 13, incluindo os conjuntos de treinamento, validação e teste (70, 15 e 15% dos dados, respectivamente). Na Tabela 14, o conjunto de teste é avaliado separadamente. O modelo inicial (*i*) utiliza como entradas as porcentagens de argila, silte e areia (%SSC), representativas da distribuição granulométrica do solo, totalizando três parâmetros de entrada. A partir da técnica *stepwise*, as demais variáveis (BD, PD, n e MO) foram, uma a uma, adicionadas como parâmetros de entrada. Para cada modelo, as redes foram treinadas com o número de neurônios na camada escondida variando entre 5 e 40 neurônios. A camada de saída consiste em 6 neurônios, representativos da umidade volumétrica em sucções pré-definidas (isto é,  $\theta_0$ ,  $\theta_6$ ,  $\theta_{10}$ ,  $\theta_{33}$ ,  $\theta_{100}$ ,  $\theta_{1500 \text{ kPa}}$ ).

O treinamento de cada umas das RNAs foi repetido 10 vezes para cada geometria e o melhor resultado em termos de *RMSE* foi o escolhido para análise. A cada treinamento, os pesos foram reinicializados. No total, portanto, são investigadas 112 *PT-RNAs*.

De acordo com os valores médios de *RMSE* e  $r^2$  obtidos para cada um dos 14 modelos, é evidente a ligação direta entre a melhoria do desempenho e a adição de pelo menos duas propriedades físicas do solo às entradas do modelo inicial *i* (%SSC). A redução do *RMSE* chega a 26% com a adição de uma propriedade de entrada (de 0.054 para 0.040 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>) e a 33% com a utilização de 5 (cinco) parâmetros de entrada (de 0.054 para 0.036 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>) para o conjunto global. Uma análise análoga pode ser realizada para o conjunto de teste (de 0.055 para 0.042 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> e de 0.055 para 0.037 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para os conjuntos global e de teste, respectivamente).

Mod	Neurônios	5		1	0	15	5	20	0	2	5	3	0	3	5	40	0	Mé	dia
Mou.	Entradas	rmse	r <sup>2</sup>	rmse	<b>r</b> <sup>2</sup>	rmse	r <sup>2</sup>												
i	%SSC	0.058	0.77	0.056	0.78	0.053	0.81	0.054	0.80	0.054	0.80	0.052	0.81	0.052	0.81	0.053	0.81	0.054	0.80
ii	%SSC, MO	0.051	0.82	0.047	0.85	0.046	0.86	0.044	0.87	0.044	0.86	0.043	0.87	0.045	0.86	0.044	0.87	0.046	0.86
iii	%SSC, PD	0.049	0.83	0.048	0.84	0.046	0.85	0.044	0.87	0.044	0.87	0.043	0.87	0.041	0.88	0.041	0.88	0.045	0.86
iv	%SSC, BD	0.046	0.85	0.044	0.87	0.043	0.87	0.041	0.88	0.041	0.88	0.039	0.89	0.040	0.89	0.039	0.89	0.042	0.88
v	%SSC, n	0.047	0.85	0.041	0.88	0.040	0.89	0.040	0.89	0.038	0.90	0.038	0.90	0.039	0.90	0.035	0.91	0.040	0.89
vi	%SSC, n, MO	0.046	0.86	0.041	0.88	0.039	0.89	0.036	0.91	0.035	0.91	0.036	0.91	0.036	0.91	0.036	0.91	0.038	0.90
vii	%SSC, n, BD	0.043	0.87	0.038	0.90	0.038	0.90	0.037	0.91	0.036	0.91	0.037	0.90	0.036	0.91	0.036	0.91	0.038	0.90
viii	%SSC, n, PD	0.041	0.88	0.040	0.89	0.037	0.90	0.037	0.91	0.035	0.92	0.035	0.92	0.035	0.92	0.034	0.92	0.037	0.91
ix	%SSC, BD, PD	0.041	0.89	0.039	0.89	0.037	0.91	0.036	0.91	0.035	0.92	0.034	0.92	0.033	0.92	0.035	0.92	0.036	0.91
X	%SSC, PD, n, MO	0.043	0.88	0.037	0.91	0.035	0.92	0.034	0.92	0.036	0.91	0.036	0.91	0.036	0.91	0.035	0.91	0.036	0.91
xi	%SSC, BD, PD, n	0.042	0.88	0.038	0.90	0.038	0.90	0.034	0.92	0.035	0.92	0.035	0.91	0.034	0.92	0.035	0.92	0.036	0.91
xii	%SSC, BD, n, MO	0.042	0.88	0.038	0.90	0.037	0.91	0.036	0.91	0.034	0.92	0.034	0.92	0.034	0.92	0.033	0.92	0.036	0.91
xiii	%SSC, BD, PD, MO	0.040	0.89	0.040	0.89	0.037	0.91	0.035	0.91	0.033	0.92	0.033	0.92	0.034	0.92	0.032	0.93	0.036	0.91
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO	0.044	0.87	0.036	0.91	0.036	0.91	0.035	0.92	0.036	0.91	0.034	0.92	0.034	0.92	0.033	0.92	0.036	0.91
	Média	0.045	0.86	0.042	0.88	0.040	0.89	0.039	0.89	0.038	0.90	0.038	0.90	0.038	0.90	0.037	0.90		

Tabela 13 - Desempenho estatístico das PT-RNAs para o conjunto global

Mad	Neurônios	5		1	0	1:	5	2	20		5	3	)	35		40		Média	
Mod.	Entradas	rmse	<b>r</b> <sup>2</sup>	rmse	<b>r</b> <sup>2</sup>	rmse	<b>r</b> <sup>2</sup>	rmse	r <sup>2</sup>	rmse	<b>r</b> <sup>2</sup>	rmse	<b>r</b> <sup>2</sup>	rmse	r <sup>2</sup>	rmse	r <sup>2</sup>	rmse	r <sup>2</sup>
i	%SSC	0.063	0.75	0.059	0.78	0.056	0.78	0.051	0.81	0.052	0.81	0.056	0.78	0.052	0.81	0.052	0.82	0.055	0.79
ii	%SSC, MO	0.055	0.81	0.049	0.84	0.049	0.84	0.047	0.85	0.049	0.85	0.042	0.87	0.047	0.85	0.045	0.86	0.048	0.85
iii	%SSC, PD	0.047	0.82	0.047	0.84	0.047	0.85	0.042	0.85	0.044	0.86	0.044	0.85	0.046	0.86	0.049	0.85	0.046	0.85
iv	%SSC, BD	0.049	0.85	0.046	0.86	0.045	0.86	0.045	0.87	0.044	0.88	0.042	0.88	0.039	0.89	0.044	0.88	0.044	0.87
v	%SSC, n	0.048	0.84	0.047	0.87	0.041	0.88	0.041	0.88	0.041	0.88	0.039	0.89	0.041	0.89	0.040	0.87	0.042	0.87
vi	%SSC, n, MO	0.047	0.85	0.047	0.87	0.042	0.88	0.037	0.89	0.039	0.90	0.040	0.86	0.033	0.92	0.037	0.90	0.040	0.88
vii	%SSC, n, BD	0.041	0.88	0.039	0.90	0.039	0.90	0.040	0.90	0.037	0.89	0.039	0.90	0.040	0.89	0.041	0.89	0.040	0.89
viii	%SSC, n, PD	0.041	0.88	0.042	0.88	0.037	0.87	0.037	0.89	0.036	0.91	0.035	0.91	0.036	0.92	0.035	0.91	0.037	0.90
ix	%SSC, BD, PD	0.041	0.88	0.037	0.90	0.037	0.91	0.039	0.90	0.039	0.88	0.037	0.89	0.040	0.88	0.037	0.92	0.039	0.89
x	%SSC, PD, n, MO	0.048	0.85	0.036	0.90	0.037	0.90	0.036	0.92	0.036	0.91	0.037	0.91	0.036	0.92	0.036	0.90	0.038	0.90
xi	%SSC, BD, PD, n	0.042	0.88	0.039	0.90	0.042	0.88	0.039	0.90	0.035	0.90	0.036	0.90	0.036	0.89	0.039	0.91	0.038	0.90
xii	%SSC, BD, n, MO	0.044	0.87	0.037	0.90	0.037	0.90	0.041	0.89	0.045	0.87	0.041	0.89	0.041	0.87	0.037	0.88	0.041	0.89
xiii	%SSC, BD, PD, MO	0.042	0.88	0.040	0.89	0.037	0.90	0.037	0.89	0.041	0.90	0.037	0.90	0.040	0.90	0.036	0.91	0.039	0.90
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO	0.044	0.86	0.039	0.90	0.041	0.91	0.035	0.91	0.037	0.92	0.039	0.90	0.039	0.90	0.039	0.91	0.039	0.90
	Média	0.047	0.85	0.043	0.87	0.042	0.88	0.041	0.88	0.041	0.88	0.040	0.88	0.040	0.88	0.040	0.89		

Tabela 14 – Desempenho estatístico das PT-RNAs para o conjunto de teste

A análise do  $r^2$  é análoga e mostra que não houve casos de fraca correlação entre os valores medidos experimentalmente e os valores estimados. Os altos valores de  $r^2$  (0.79 a 0.90 no conjunto de teste) indicam que uma grande proporção da variabilidade da *CRAS* pode ser explicada pelos modelos empíricos criados utilizando propriedades físicas do solo (ou seja, a textura do solo, BD, n, PD e OM).

Para os modelos com 6 (seis) ou 7 (sete) parâmetros de entrada, os valores médios de *RMSE* e  $r^2$ são constantes para o conjunto total (0.036 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> e 0.91, respectivamente). Para o conjunto de teste, os valores médios de RMSE crescem se comparados aos modelos com 5 (cinco) parâmetros de entrada. A análise indica, portanto, que a adição de mais do que 2 (duas) das 4 (quatro) propriedades físicas investigadas não é justificada, pois não representa melhoria significativa na capacidade de predição e generalização dos modelos propostos. Essa conclusão vai ao encontro do trabalho de Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012) para as *PT-RNAs*, que mostrou que a adição de entradas (no caso, a densidade do solo e o teor de carbono orgânico) ao modelo com %*SSC* não necessariamente levou a melhores previsões. Dessa forma, a eficiência do aumento do número de parâmetros de entrada pode ser afetada pelas características do banco de dados, como a interdependência existente entre os parâmetros de entrada.

A análise dos modelos ii-v permite ordenar as variáveis em ordem de importância. Os resultados indicam maior influência da porosidade total (n) e da densidade do solo (BD) na estimativa da umidade volumétrica do solo, uma vez que os modelos com essas propriedades apresentam menor *RMSE* e valores superiores de  $r^2$  dentre os modelos ii-v. Esse resultado é esperado a partir da matriz de correlação apresentada na Tabela 11. Dessa forma, n é a variável que melhor explica a variação da umidade volumétrica do solo para o banco de dados investigado e, por isso, é utilizada em todos os demais modelos analisados – com exceção do modelo ix.

Para os modelos com 5 parâmetros de entrada (modelos *vi-ix*), justamente o modelo *ix* (BD e PD) e, portanto, sem a porosidade total (n), se destaca no conjunto global, ao resultar no menor valor médio de *RMSE* (0.036 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>). O modelo *viii* (n e PD) se destaca para o conjunto de treinamento. As três variáveis (n, BD e PD) estão relacionadas à estrutura do solo e existe uma relação física conhecida entre elas. Os resultados sugerem que qualquer combinação de 2 dessas 3 variáveis fornece estimativas satisfatórias. Essas combinações serão discutidas adiante na análise para diferentes trechos da curva.

O aumento do número de neurônios da camada escondida proporcionou melhoria relativamente contínua na capacidade preditiva das *PT-RNAs*, com diminuição do *RMSE* e crescimento do *r*<sup>2</sup>. O valor médio do *RMSE* para os modelos com 5 neurônios foi de 0.045 e 0.047 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para os conjuntos total e de teste, respectivamente; com 40 neurônios, esses valores foram de 0.037 e 0.040 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>. Entretanto, observa-se que a partir de 30 neurônios, a diminuição do erro está associada apenas ao conjunto de treinamento, responsável pelo ajuste dos pesos sinápticos, e que a *RNA* perde a capacidade de generalização, uma vez que o erro no conjunto de teste permanece constante.

As Figuras 21 a 23 mostram uma comparação entre os conjuntos de treinamento e de teste para todas as *PT-RNAs* analisadas com 3 ou 4, 4 ou 5, e 5, 6 ou 7 parâmetros de entrada, respectivamente. O número ótimo de neurônios, aqui definido como aquele associado ao menor valor de *RMSE* do conjunto de teste, foi menor do que 40 para 13 dos 14 modelos treinados. Portanto, entende-se que modelos com mais de 35 neurônios não proporcionam melhora na capacidade de generalização das *PT-RNAs* treinadas e estão sujeitos ao *overfitting*. Esse número é superior ao observado para as pesquisas utilizando essa abordagem apresentadas no tópico 2.7, e indica grande variabilidade de amostras de solo para o banco de dados investigado nesta pesquisa.



Figura 21 – Desempenho de *PT-RNAs* com 3 ou 4 parâmetros de entrada para (a) o conjunto de treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)

Fonte: Autor (2020)





Fonte: Autor (2020)

Figura 23 – Desempenho de *PT-RNAs* com 5, 6 ou 7 parâmetros de entrada para (a) o conjunto de treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)



Fonte: Autor (2020)

As Figuras 21 a 23 reforçam ainda a relação direta entre a adição de parâmetros de entrada e a minimização do *RMSE* para os modelos com 3 ou 4 (Fig. 21) e 4 ou 5 entradas (Fig. 22). Para esses modelos, a redução dos erros com a adição de propriedades é observada independentemente do número de neurônios na camada escondida. Para a Figura 23, esse comportamento se altera, e

os modelos com 5, 6 ou 7 parâmetros de entrada apresentam valores de *RMSE* similares, com pequenas variações, sugerindo o efeito de fatores como a divisão dos dados entre os conjuntos de treinamento, validação e teste e a influência dos pesos de conexões iniciais no desempenho das *PT-RNAs*.

Os menores valores de *RMSE* obtidos para o conjunto de treinamento frente ao conjunto de teste são esperados, uma vez que o ajuste dos pesos sinápticos de uma *RNA* é realizado a partir desse conjunto. O conjunto de teste funciona como um conjunto independente no qual os pesos sinápticos são apenas aplicados e não mais ajustados. O valor mínimo para o *RMSE* do conjunto de treinamento foi de 0.029 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>, e de 0.033 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para o conjunto de teste.

Os valores de *RMSE* obtidos para as *PT-RNAs* modeladas neste trabalho (entre 0.032 e 0.063 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para o conjunto global) são similares a modelos de *PT-RNA* encontrados na literatura, como mostra a Tabela 15. Embora cada estudo tenha suas peculiaridades, sendo propostos para diferentes bancos de dados e com variações na geometria das *RNAs* e na forma de apresentação dos números, os resultados se mostram satisfatórios.

Referência	RMSE (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )
Schaap e Bouten (1996)	0.020 a 0.047
Borgesen e Schaap (2005)	0.030 a 0.051
Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012)	0.029 a 0.035
De Melo e Pedrollo (2015)	0.050 a 0.098
Nguyen e outros (2017)	0.043 a 0.053
Totola (2020)	0.032 a 0.063

Tabela 15 - Variação do RMSE para PT-RNAs para diferentes estudos

A comparação com PTFs desenvolvidas para solos brasileiros a partir de outras técnicas é difícil. Barros e van Lier (2014) mostram a ausência do cálculo do *RMSE* para a maioria das *PTFs* analisadas, ou valores inconsistentes (como valores negativos) para o parâmetro. Similar a este estudo, o trabalho de Tomasella e outros (2003) também estimou pontos da *CRAS* e obteve valores de *RMSE* próximos ao desta pesquisa (entre 0.020 e 0.040 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> e 0.024 e 0.046 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para os conjuntos de treinamento e de teste, respectivamente).

De maneira geral, para o banco de dados de 565 amostras de solo utilizado, os resultados indicam a performance satisfatória de *PT-RNAs* com pelo menos 20 neurônios na camada escondida e com a adição às porcentagens de areia, silte e argila do solo (%SSC) de pelo menos duas das quatro propriedades investigadas: *BD*, *PD*, *n* e *MO*. A adição de parâmetros de entradas e o aumento do número de neurônios (e, consequentemente, do número de pesos sinápticos) além desses valores, está ligado a uma diminuição do erro do conjunto de treinamento, e não ao aumento da capacidade de generalização dos modelos investigados. Esta conclusão é reforçada pela Figura 24, que ilustra a variação do *RMSE* para os conjuntos de treinamento e de teste com o número de pesos sinápticos de cada uma das 112 *PT-RNAs* analisadas. Para o conjunto de teste (Fig. 24b), os menores erros são observados para *PT-RNAs* com aproximadamente 300 pesos sinápticos.



Figura 24 – Variação do *RMSE* com o número de pesos sinápticos para as *PT-RNAs* para o (a) conjunto de treinamento e (b) conjunto de testes

Fonte: Autor (2020)

De forma a avaliar a influência da estrutura das RNAs, modelos com duas e três camadas de neurônios escondidos foram investigados. A partir do modelo *xiv*, com todos os parâmetros de entrada utilizados na pesquisa, 16 *RNAs* com duas camadas foram investigadas, com variação do número de neurônios entre 7 e 28 em cada camada. A variação do *RMSE* para o conjunto total e para o conjunto independente de teste é mostrada na Tabela 16. Em adição, 6 *PT-RNAs* com 3 camadas escondidas são avaliadas na Tabela 17.

Madala	Entrodog	Continuto	N		Ncamada2								
Modelo	Entradas	Conjunto	INCAMADA1	7	14	21	28						
			7	0.036	0.036	0.035	0.035						
		Global	14	0.034	0.036	0.034	0.034						
			21	0.036	0.037	0.034	0.033						
	%SSC, BD,		28	0.034	0.034	0.035	0.034						
XIV	PD, n, MO		7	0.040	0.036	0.037	0.042						
		Teste	14	0.035	0.039	0.039	0.037						
			21	0.040	0.037	0.036	0.044						
			28	0.036	0.035	0.046	0.040						

Tabela 16 - Variação do RMSE para os modelos com 2 camadas escondidas (conjunto global e de teste)

Tabela 17 – Variação do RMSE para os modelos com 3 camadas escondidas (conjunto global e de teste)

Madala	Entradag	N	N	N	RMSE (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )			
Modelo	Entradas	INCAMADA1	INCAMADA2	INCAMADA3	Global	Teste		
		7	7	7	0.039	0.040		
		7	7	14	0.038	0.039		
•	%SSC, BD, PD,	14	14	7	0.032	0.044		
XIV	n, MO	14	14	14	0.035	0.039		
		21	7	7	0.034	0.039		
		28	7	7	0.036	0.036		

A variação do *RMSE* sugere que a alteração no número de camadas não gera mudanças significativas na capacidade de previção das *PT-RNAs* treinadas. Independentemente do número de neurônios em cada camada, os modelos com duas camadas escondidas apresentam pequena

variação para o *RMSE*, atingindo o mínimo de 0.033 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para o conjunto global. Maior variação é observada dentre os modelos com 3 camadas escondidas (0.032 a 0.039 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>). Para o conjunto de teste, o valor mínimo de *RMSE* de 0.035 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para o modelo *xiv* é igual ao mínimo obtido para as *PT-RNAs* com apenas uma camada escondida.

A Figura 25 mostra a relação entre o número de pesos sinápticos e o *RMSE* para o modelo *xiv* para a variação do número de camadas escondidas. A análise do *RMSE* para o conjunto de treinamento (Fig. 25a) indica que a estrutura ou forma de distribuição dos neurônios em mais de uma camada escondida tem efeito sobre o desempenho das *RNAs* para estimativa da *CRAS*. Entretanto, a análise do conjunto de teste (Fig. 25b) sugere que não ocorre efeito na capacidade de generalização das *RNAs*, uma vez que o valor mínimo de *RMSE* é similar entre as *PT-RNAs* investigadas, independentemente do número de camadas escondidas utilizado.





Fonte: Autor (2020)

A utilização de uma quantidade elevada de neurônios sugere o *overfitting*, uma vez que o erro do conjunto de teste (Fig. 25b) cresce a partir de um determinado número de pesos sinápticos: 300 pesos para as *PT-RNAs* com uma camada escondida e 750 pesos para as *PT-RNAs* com duas camadas escondidas, por exemplo. Nestes casos, os menores valores de *RMSE* associados ao conjunto global estão ligados apenas ao conjunto de treinamento e não se refletem no conjunto independente de teste.

#### 4.3.3 Estrutura Hierárquica

Para facilitar o uso de *RNAs*, uma estrutura hierárquica é proposta de forma a permitir a utilização de solos com informações limitadas ou mais detalhadas de suas propriedades físicas. Dessa forma, maior flexibilidade é dada quanto aos parâmetros de entrada necessários para a estimativa da *CRAS* limite de secagem de um solo. Embora as *PT-RNAs* treinadas apresentem resultados satisfatórios independentemente do modelo, maior precisão é alcançada quando mais parâmetros de entrada são fornecidos ao modelo, como mostra a Figura 26 a partir da comparação entre os valores estimados por *PT-RNAs* e os valores obtidos experimentalmente ( $\theta_{est} \in \theta_{lab}$ , respectivamente).

Um a um, os parâmetros de entrada (BD, PD, n e MO, respectivamente) foram adicionados ao modelo *i*, com apenas informações sobre a textura do solo (%SSC) como parâmetros de entrada. A geometria ótima de cada modelo – associada ao número de neurônios para o qual o menor erro no conjunto de teste foi alcançado – foi utilizada para estimativa da umidade volumétrica ( $\theta_{est}$ ). Conforme discutido anteriormente, o acréscimo de pelo menos dois parâmetros de entrada, especialmente relacionados à estrutura do solo, resulta em melhores estimativas para as *PT-RNAs*. O *r*<sup>2</sup> cresce de 0.80 para 0.92 quando comparados os modelos *i* (SSC) e *ix* (SSC, BD e PD). Para os modelos com a adição do que mais de dois parâmetros não ocorre melhoria significativa das estimativas.



Figura 26 – Comparação entre  $\theta_{lab}$  e  $\theta_{est}$  para modelos de *PT-RNAs* (a) SSC (b) SSC, BD, (c) SSC, BD, PD, (d) SSC, BD, PD, n e (e) SSC, BD, PD, n, MO

Fonte: Autor (2020)

#### 4.4 Modelo Pseudocontínuo (PC-RNAs)

#### 4.4.1 Influência dos Parâmetros de Entrada e do Número de Neurônios na Camada Escondida

Analogamente ao modelo pontual, o modelo pseudocontínuo foi utilizado para previsão da *CRAS* limite superior de secagem das 565 amostras de solos do *HYBRAS*. Seguindo a mesma metodologia, a influência da adição de uma propriedade dentre as 4 disponíveis (BD, PD, n e MO) foi investigada a partir da comparação com o modelo inicial *i*, que utilizou, além do logaritmo da sucção ln(h), apenas as porcentagens de argila, silte e areia (%SSC) como parâmetros de entrada. Para cada modelo, as *PC-RNAs* foram treinadas com o número de neurônios na camada escondida variando entre 5 e 120, totalizando 168 PC-*RNAs*. A camada de saída consiste em apenas um neurônio, representativo da umidade volumétrica em qualquer sucção ( $\theta_h$ ).

As Tabelas 18 e 19 mostram o *RMSE* calculado para cada uma da *PC-RNAs*, e o r<sup>2</sup> médio de cada um dos modelos, para o conjunto global e de teste, respectivamente. Novamente, os dados foram divididos em três conjuntos: 70% para treinamento, 15% para validação e 15% para teste. Destacase que esta abordagem permite a utilização de pontos experimentais obtidos para qualquer valor de sucção, totalizando 4034 pontos para as 565 amostras de solo investigadas.

Diferentemente da abordagem pontual, a abordagem pseudocontínua indica associação direta de redução do *RMSE* e crescimento do *r*<sup>2</sup> com o aumento do número de parâmetros de entrada. Nesse sentido, o *RMSE* decresce de 0.051 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> do modelo *i* para 0.030 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para o modelo *xiv*, com 8 parâmetros de entrada, uma diminuição de aproximadamente 41%. A análise do conjunto de teste é análoga, com decréscimo de 0.054 para 0.033 cm<sup>2</sup> (redução de 39%). Essa conclusão vai ao encontro de vários trabalhos (SCHAAP; LEIJ, 1998; SCHAAP; LEIJ; VAN GENUCHTEN, 2001; MINASNY; MCBRATNEY, 2002; VEREECKEN *et al.*, 2010), que reportam que a consideração de mais variáveis de entrada pode melhorar a eficiência dos modelos de *RNAs*. De fato, esse fator é especialmente importante para a abordagem pseudocontínua, que assume maior complexidade nas relações entre os parâmetros de entrada e saída ao utilizar apenas um parâmetro de saída.

Mad	Entradag	Neurônios na camada escondida											RMSE	<i>r</i> <sup>2</sup>	
Mou.	Entrauas	5	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	120	médio	médio
i	%SSC, ln(h)	0.058	0.056	0.053	0.053	0.051	0.049	0.049	0.049	0.048	0.047	0.048	0.049	0.051	0.82
ii	%SSC, MO, ln(h)	0.053	0.047	0.043	0.042	0.041	0.040	0.038	0.041	0.042	0.043	0.037	0.041	0.042	0.87
iii	%SSC, PD, ln(h)	0.052	0.048	0.043	0.040	0.039	0.039	0.038	0.034	0.034	0.034	0.035	0.036	0.039	0.89
iv	%SSC, BD, ln(h)	0.049	0.044	0.040	0.039	0.037	0.035	0.035	0.033	0.035	0.035	0.034	0.035	0.037	0.90
v	%SSC, n, ln(h)	0.048	0.043	0.038	0.036	0.034	0.033	0.034	0.033	0.033	0.032	0.030	0.031	0.035	0.91
vi	%SSC, n, MO, ln(h)	0.047	0.042	0.039	0.036	0.031	0.031	0.030	0.030	0.030	0.029	0.028	0.029	0.033	0.92
vii	%SSC, n, BD, ln(h)	0.044	0.041	0.036	0.032	0.031	0.030	0.029	0.029	0.028	0.027	0.029	0.028	0.032	0.93
viii	%SSC, n, PD, ln(h)	0.046	0.041	0.036	0.036	0.033	0.031	0.030	0.030	0.028	0.027	0.028	0.028	0.033	0.92
ix	%SSC, BD, PD, ln(h)	0.043	0.039	0.036	0.034	0.033	0.031	0.031	0.030	0.029	0.029	0.028	0.028	0.033	0.92
х	%SSC, PD, n, MO, ln(h)	0.044	0.039	0.033	0.031	0.028	0.026	0.026	0.029	0.028	0.028	0.027	0.025	0.030	0.93
xi	%SSC, BD, PD, n, ln(h)	0.043	0.039	0.036	0.033	0.030	0.030	0.029	0.028	0.028	0.024	0.028	0.028	0.031	0.93
xii	%SSC, BD, n, MO, ln(h)	0.046	0.041	0.033	0.031	0.029	0.029	0.029	0.028	0.027	0.028	0.027	0.027	0.031	0.93
xiii	%SSC, BD, PD, MO, ln(h)	0.044	0.039	0.035	0.032	0.031	0.028	0.028	0.027	0.029	0.027	0.027	0.028	0.031	0.93
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO, ln(h)	0.043	0.038	0.033	0.031	0.029	0.025	0.025	0.025	0.026	0.025	0.028	0.028	0.030	0.94
	RMSE Médio	0.047	0.043	0.038	0.036	0.034	0.033	0.032	0.032	0.032	0.031	0.031	0.031		
	R <sup>2</sup> Médio	0.84	0.87	0.90	0.91	0.92	0.92	0.92	0.93	0.93	0.93	0.93	0.93		

Tabela 18 - Variação do RMSE e resumo estatístico das PC-RNAs para o conjunto global

Mad	Entro do s	Neurônios na camada escondida											RMSE	<b>r</b> <sup>2</sup>	
Moa.	Entradas	5	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	120	Médio	Médio
i	%SSC, ln(h)	0.059	0.057	0.055	0.055	0.051	0.053	0.055	0.055	0.057	0.048	0.054	0.056	0.054	0.79
ii	%SSC, MO, ln(h)	0.056	0.049	0.045	0.045	0.045	0.044	0.047	0.045	0.047	0.044	0.050	0.048	0.047	0.85
iii	%SSC, PD, ln(h)	0.053	0.048	0.046	0.042	0.045	0.042	0.040	0.039	0.039	0.041	0.042	0.044	0.043	0.87
iv	%SSC, BD, ln(h)	0.049	0.044	0.045	0.040	0.039	0.039	0.039	0.036	0.039	0.039	0.042	0.041	0.041	0.88
v	%SSC, n, ln(h)	0.047	0.042	0.039	0.037	0.036	0.036	0.037	0.036	0.036	0.040	0.039	0.037	0.039	0.89
vi	%SSC, n, MO, ln(h)	0.049	0.042	0.040	0.040	0.033	0.035	0.035	0.035	0.035	0.033	0.035	0.035	0.037	0.90
vii	%SSC, n, BD, ln(h)	0.046	0.044	0.035	0.035	0.036	0.033	0.033	0.036	0.036	0.035	0.036	0.032	0.036	0.91
viii	%SSC, n, PD, ln(h)	0.046	0.044	0.036	0.037	0.035	0.035	0.036	0.033	0.033	0.035	0.032	0.035	0.036	0.91
ix	%SSC, BD, PD, ln(h)	0.044	0.041	0.036	0.033	0.035	0.036	0.036	0.037	0.036	0.033	0.035	0.032	0.036	0.91
x	%SSC, PD, n, MO, ln(h)	0.045	0.039	0.035	0.033	0.029	0.030	0.029	0.033	0.035	0.031	0.033	0.030	0.033	0.92
xi	%SSC, BD, PD, n, ln(h)	0.046	0.039	0.039	0.036	0.037	0.032	0.035	0.033	0.033	0.030	0.032	0.033	0.035	0.91
xii	%SSC, BD, n, MO, ln(h)	0.048	0.041	0.035	0.033	0.032	0.031	0.033	0.033	0.031	0.031	0.033	0.035	0.035	0.92
xiii	%SSC, BD, PD, MO, ln(h)	0.047	0.042	0.040	0.036	0.033	0.031	0.029	0.033	0.033	0.033	0.033	0.032	0.035	0.91
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO, ln(h)	0.044	0.039	0.033	0.035	0.030	0.029	0.029	0.031	0.030	0.031	0.031	0.035	0.033	0.92
	RMSE Médio	0.047	0.043	0.042	0.041	0.041	0.040	0.040	0.040	0.047	0.043	0.042	0.041		
	r <sup>2</sup> Médio	0.83	0.86	0.88	0.89	0.90	0.91	0.91	0.90	0.90	0.91	0.90	0.90		

Tabela 19 – Variação do RMSE e resumo estatístico das PC-RNAs para o conjunto de teste

A análise dos modelos com 4 parâmetros de entrada (*ii* a *v*) indica, novamente, maior influência da porosidade total (n) e da densidade do solo (BD) na previção da umidade volumétrica do solo e da *CRAS* limite de secagem. Entre os modelos com 5 parâmetros de entrada (modelos *vi-ix*), nenhum dos modelos investigados se sobressai e os resultados são similares. Contudo, esses modelos apresentam redução do *RMSE* em relação aos modelos com 4 entradas, analisando tanto o conjunto total como o conjunto de teste.

Em relação ao número de neurônios, uma divergência é observada entre os dois conjuntos. Para o conjunto global, o valor médio do *RMSE* decresce continuamente com o aumento do número de neurônios de 5 para 120 (0.047 para 0.031 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>, equivalente a uma redução de 34%), enquanto o valor de *r*<sup>2</sup> cresce de 0.84 para 0.93. Entretanto, para o conjunto de teste, o valor mínimo para o *RMSE* médio é alcançado quando 50, 60 ou 70 neurônios são utilizados na camada escondida (0.040 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>). A partir de 70 neurônios e do consequente crescimento do número de pesos sinápticos associado, as *PC-RNAs* treinadas sugerem perda em sua capacidade de generalização ao aprender as particularidades do conjunto de treinamento (*overfitting*).

Esse comportamento é reforçado pelas Figuras 27 a 29, que comparam os conjuntos de treinamento e de teste para os catorze modelos analisados. A diminuição relativamente constante do *RMSE* para o conjunto de treinamento com o aumento do número de neurônios não se repete dentro do conjunto de teste. Analogamente às *PT-RNAs*, o menor valor de *RMSE* para o conjunto de treinamento de cada modelo em relação ao conjunto de teste apresenta um comportamento esperado. Assim, o *RMSE* do conjunto de treinamento atingiu um mínimo de 0.022 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>, mas não passa de 0.029 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para o conjunto de teste.

De maneira geral, o conjunto de teste indica uma performance satisfatória de qualquer modelo investigado nesta abordagem com pelo menos 50 neurônios na camada escondida – número semelhante ao obtido por Pham e outros (2019), utilizando a mesma abordagem, e um comportamento que indica *overfitting* quando esse número ultrapassa o de 100 neurônios. Além disso, a minimização do *RMSE* está diretamente ligada ao aumento do número de parâmetros de entrada utilizados.



Figura 27 – Desempenho de *PC-RNAs* com 4 ou 5 parâmetros de entrada para (a) o conjunto de treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)

Fonte: Autor (2020)

Figura 28 – Desempenho de *PC-RNAs* com 5, 6 ou 7 parâmetros de entrada para (a) o conjunto de treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)



Fonte: Autor (2020)



Figura 29 – Desempenho de *PC-RNAs* com 6, 7 ou 8 parâmetros de entrada para (a) o conjunto de treinamento (70%) e (b) conjunto de teste (15%)

Fonte: Autor (2020)

Assim como para as *PT-RNAs*, o aumento do número de neurônios está ligado a diminuição do erro global, mas não no poder de generalização dos modelos investigados. A Figura 30 mostra a variação do *RMSE* com o número de pesos sinápticos para as 168 *PC-RNAs* treinadas. A tendência de decréscimo contínuo do conjunto de treinamento (Fig. 30a) não se repete no conjunto de teste (Fig. 30b), que atinge o valor mínimo de *RMSE* em torno de 550 pesos sinápticos, valor inferior ao número total de amostras (565) e longe do número total de exemplos apresentados para a utilização dessa abordagem (4034).

Assim como para a abordagem pontual, a variação do *RMSE* para as *PC-RNAs* desenvolvidas neste trabalho se mostra satisfatória quando comparada aos resultados de outros autores que também utilizaram esta abordagem para o desenvolvimento de *PTFs* do tipo *RNA* para estimativa da *CRAS*, como mostra a Tabela 20.



Figura 30 – Variação do *RMSE* com o número de pesos sinápticos para as *PC-RNAs* para o (a) conjunto de treinamento e (b) conjunto de teste.

Fonte: Autor (2020)

Tabela 20 - Variação do RMSE para as PC-RNAs de diferentes estudos

Referência	RMSE (cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )
Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012)	0.027 a 0.049
De Melo e Pedrollo (2015)	0.088
Nguyen e outros (2017)	0.044-0.052
Pham e outros (2019)	0.030-0.059
Totola (2020)	0.025-0.059

# 4.4.2 Influência do Número de Camadas Escondidas

De forma a avaliar a adição de camadas nas *RNAs*, modelos com duas e três camadas de neurônios foram investigados. A variação do *RMSE* para o conjunto total e para o conjunto independente de teste são mostrados nas Tabelas 21 e 22, respectivamente. A partir do modelo *xiv*, com todos os parâmetros de entrada utilizados na pesquisa, 36 *PC-RNAs* com duas camadas escondidas foram

investigadas, variando-se o número de neurônios nas duas camadas entre 8 e 32. Além disso, outras 10 *PC-RNAs* com 3 camadas escondidas também são avaliadas.

Madala	Entrodog	Coniunto	N	NCAMADA2						
Modelo	Entradas	Conjunto	INCAMADA1	8	16	24	32			
	%SSC, BD, PD, n, MO, ln(h)	Total	8	0.035	0.032	0.030	0.028			
			16	0.030	0.026	0.027	0.025			
			24	0.030	0.026	0.024	0.024			
:			32	0.026	0.024	0.026	0.023			
XIV		Teste	8	0.036	0.033	0.031	0.033			
			16	0.035	0.029	0.031	0.030			
			24	0.031	0.029	0.028	0.030			
			32	0.032	0.031	0.030	0.029			

Tabela 21 – Variação do RMSE para as PC-RNAs com 2 camadas escondidas (conjuntos global e de teste)

Tabela 22 - Variação do RMSE para as PC-RNAs com 3 camadas escondidas (conjuntos global e de teste)

Mod	Entradas	Nauro	Nauron	Nauruna	NPESOS	RMSE		
MIOU.	Entrauas	INCAMADAI	INCAMADA2	INCAMADA3	SINÁPTICOS	Total	Teste	
		8	16	16	505	0.026	0.030	
	%SSC, BD, PD, n, MO, ln(h)	12	12 12 12		433	0.027	0.031	
		16	8	8	361	0.027	0.029	
		16	12	12 517		0.027	0.030	
		16	16	8	561	0.025	0.029	
XIV		16	16	12	633	0.022	0.028	
		16	16	16	705	0.025	0.029	
		24	12	8	629	0.026	0.030	
		24	16	8	761	0.023	0.031	
		32	32	8	1617	0.025	0.030	

Os resultados obtidos mostram uma redução global do *RMSE* para o conjunto de treinamento, com *RMSE* mínimo de 0.021 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para as *PC-RNAs* com duas camadas e de 0.022 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para as *PC-RNAs* com três camadas escondidas. Para o conjunto de teste, a *PC-RNA* com 24 neurônios na primeira camada e 24 na segunda camada escondida apresenta *RMSE* de 0.028 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>, o menor dentre todos os modelos testados, e próximo ao mínimo obtido para os modelos com apenas uma camada escondida (0.029 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>).

A Figura 31 mostra a variação do *RMSE* e do número de pesos sinápticos para os conjuntos de treinamento e de teste para as *PC-RNAs* treinadas com 1, 2 e 3 camadas escondidas para o modelo *xiv*. Entre 550 e 825 neurônios são observados os menores valores de *RMSE* para os dois conjuntos e o acréscimo indefinido de pesos sinápticos não está relacionado com melhoria na capacidade de estimativa das RNAs. Os resultados evidenciam a influência da estrutura da distribuição de neurônios nas PC-*RNAs*, uma vez que modelos com o mesmo número de pesos sinápticos, mas diferentes geometrias, apresentam variação no valor de RMSE obtido. Mas, para este trabalho, a utilização de 1, 2 ou 3 camadas não alterou a capacidade de generalização das PC-*RNAs*, analisada por meio do conjunto de teste, conforme Fig. 31b.

Figura 31 – Variação do *RMSE* do modelo *xiv* (PC-RNA) com 1, 2 e 3 camadas escondidas: (a) conjunto de treinamento (b) conjunto de teste



Fonte: Autor (2020)

#### 4.4.3 Estrutura Hierárquica

Assim como para o modelo pontual, uma estrutura hierárquica é proposta de forma a permitir a utilização de amostras com informações limitadas ou mais detalhadas para a previsão da *CRAS*. A Figura 32 mostra o aumento da precisão dos modelos associada ao crescimento do número de parâmetros de entrada fornecidos para as *PC-RNAs*, conforme discutido anteriormente. Nesse sentido, o  $r^2$  passa de 0.82 para o modelo com apenas informações da distribuição granulométrica do solo (%SSC) e chega a 0.96 quando todos os parâmetros de entrada investigados neste estudo estão disponíveis para uma amostra de solo.



 $\begin{array}{l} Figura \ 32 - Comparação entre \ \theta_{lab} \ e \ \theta_{est} \ para \ as \ PC-RNAs: (a) \ SSC \ e \ ln(h), (b) \ SSC, \ BD \ e \ ln(h), (c) \ SSC, \ BD, \ PD \ e \ ln(h), (d) \ SSC, \ BD, \ PD, \ n \ e \ ln(h) \ e \ (e) \ SSC, \ BD, \ PD, \ n, \ MO \ e \ ln(h) \end{array}$ 

## 4.5 Comparação entre as PT-RNAs e PC-RNAs

# 4.5.1 Desempenho dos Conjuntos Global e de Teste

Neste tópico, o desempenho de *RNAs* treinadas com somente uma camada escondida para as abordagens pontual (112 *RNAs*) e pseudocontínua (168 *RNAs*) é comparado e analisado. A Tabela 23 traz um resumo dos modelos ótimos (número de neurônios associado ao valor mínimo de *RMSE* para o conjunto de teste) para os catorze modelos investigados. Dentro dos cenários considerados, a capacidade de estimativa e a precisão da abordagem pseudocontínua foi quase sempre superior à da abordagem pontual. Os resultados evidenciam, portanto, a influência da topologia e da estrutura das *RNAs*, isto é, a forma que são realizadas as conexões entre os neurônios do modelo, na sua capacidade de predição, o que corrobora com os estudos de Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012) e Pham e outros (2019).

			Pon	tual	Pseudocontínua					
Mod.	Entradas*	N	RMSE (	cm <sup>3</sup> .cm <sup>-3</sup> )	?	N	RMSE (	2		
		INe	Global	Teste	Γ2	INe	Global	Teste	Г"	
i	%SSC	20	0.054	0.051	0.80	90	0.047	0.048	0.84	
ii	%SSC, MO	30	0.043	0.042	0.87	50	0.040	0.044	0.89	
iii	%SSC, PD	20	0.044	0.042	0.87	70	0.034	0.039	0.92	
iv	%SSC, BD	35	0.040	0.039	0.89	70	0.033	0.036	0.92	
v	%SSC, n	30	0.038	0.039	0.90	80	0.033	0.036	0.93	
vi	%SSC, n, MO	35	0.036	0.033	0.91	40	0.031	0.033	0.93	
vii	%SSC, n, BD	25	0.036	0.037	0.91	120	0.028	0.032	0.95	
viii	%SSC, n, PD	30	0.035	0.035	0.92	100	0.028	0.032	0.94	
ix	%SSC, BD, PD	30	0.034	0.037	0.92	120	0.028	0.032	0.95	
X	%SSC, PD, n, MO	20	0.034	0.036	0.92	60	0.026	0.029	0.95	
xi	%SSC, BD, PD, n	25	0.035	0.035	0.92	90	0.024	0.030	0.96	
xii	%SSC, BD, n, MO	15	0.037	0.037	0.92	50	0.029	0.031	0.94	
xiii	%SSC, BD, PD, MO	40	0.032	0.036	0.93	60	0.028	0.029	0.95	
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO	20	0.035	0.035	0.92	50	0.025	0.029	0.96	

Tabela 23 – Desempenho da geometria ótima de cada modelo de *PT-RNA* e *PC-RNA* para os conjuntos global e de teste

\* ln(h) também é utilizado como entrada para a abordagem pseudocontínua.

Entre as diferenças para as duas topologias já citadas anteriormente, destaca-se o acréscimo do ln(h) como parâmetro de entrada e a utilização de um número maior de pontos experimentais para a abordagem pseudocontínua. Uma importante vantagem das *PC-RNAs* é sua estrutura específica que permite aumentar o número de pares ( $\theta$ -h) utilizados para o treinamento. Considerando apenas as 565 amostras investigadas neste estudo, um total de 644 pares adicionais puderam ser utilizados, contribuindo para o melhor desempenho dessa abordagem. Além disso, a abordagem permite estimar  $\theta$  para qualquer valor de sucção dentro do intervalo utilizado (0 a 1500 kPa), enquanto que a abordagem pontual se restringe aos seis pontos pré-definidos.

## 4.5.2 Desempenho para diferentes trechos da CRAS

A Tabela 24 apresenta o desempenho médio de *PT-RNAs* de uma camada escondida para diferentes valores de sucção e, portanto, para diferentes trechos da *CRAS*. O valor do *RMSE* é calculado como a média dos valores obtidos para as 112 *PT-RNAs* treinadas (isto é, 8 para cada um dos 14 modelos), de forma a ignorar o efeito do número de neurônios na camada escondida. Essa abordagem permite a investigação de 6 pontos experimentais nas sucções comuns à todas as amostras de solo (0, 6, 10, 33, 100 e 1500 kPa).

Para o modelo baseado apenas na textura (%SSC), as melhores estimativas ocorrem para as sucções mais altas, na parte seca da *CRAS*, onde as forças de adsorção controlam o comportamento hidráulico do solo. Quando a densidade aparente seca do solo (BD) ou a porosidade total (n) são adicionadas como parâmetros de entrada, o comportamento se altera, e valores mais baixos do *RMSE* são observados para as sucções mais baixas, na parte úmida da *CRAS*. Esse resultado corrobora com os resultados de Moreira De Melo e Pedrollo (2015) e vai na contramão dos resultados obtidos por Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012). Uma possibilidade é o fato da porosidade total (n) ter sido adicionada como parâmetro de entrada, propriedade importante para explicar a variação da umidade volumétrica e o comportamento hidráulico no trecho úmido da *CRAS*, fortemente governado pela estrutura do solo.

		Sucção (kPa)								
Mod.	Entradas	θο	θ6	θ10	θ33	θ100	θ1500			
i	%SSC	0.061	0.051	0.056	0.054	0.051	0.050			
ii	%SSC, MO	0.047	0.042	0.048	0.047	0.045	0.045			
iii	%SSC, PD	0.048	0.041	0.046	0.045	0.043	0.044			
iv	%SSC, BD	0.031	0.041	0.045	0.045	0.043	0.044			
v	%SSC, n	0.024	0.041	0.043	0.043	0.041	0.043			
vi	%SSC, n, MO	0.025	0.038	0.041	0.041	0.039	0.042			
vii	%SSC, n, BD	0.024	0.038	0.041	0.040	0.038	0.041			
viii	%SSC, n, PD	0.023	0.038	0.040	0.039	0.038	0.040			
ix	%SSC, BD, PD	0.023	0.037	0.039	0.038	0.037	0.040			
х	%SSC, PD, n, MO	0.024	0.037	0.039	0.038	0.037	0.040			
xi	%SSC, BD, PD, n	0.024	0.037	0.039	0.039	0.037	0.041			
xii	%SSC, BD, n, MO	0.023	0.037	0.038	0.038	0.037	0.040			
xiii	%SSC, BD, PD, MO	0.024	0.036	0.038	0.038	0.036	0.039			
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO	0.024	0.037	0.038	0.038	0.037	0.040			

Tabela 24 - RMSE médio para as PT-RNAs treinadas com relação a diferentes sucções (h)

A mesma investigação é realizada para as 168 *PC-RNAs* treinadas (12 para cada um dos 14 modelos). Essa abordagem permite a investigação de valores adicionais de sucção além dos seis valores comuns para todas as amostras de solo. Assim, a Tabela 25 mostra o *RMSE* médio para valores de umidade volumétrica que apresentam medições para pelo menos 45 amostras de solo investigadas (0, 0.1, 1, 2, 4, 6, 10, 33, 100, 300, 500 e 1500 kPa).

Para os valores de sucção comuns analisados nas duas abordagens (0, 6, 10, 33, 100 e 1500 kPa), com exceção de  $\theta_0$ , o *RMSE* médio é menor para a abordagem pseudocontínua. A redução do erro é mais expressiva para as estimativas de  $\theta_{333}$  e  $\theta_{1000}$ , e chega a 27% para o modelo *xiv*.

Para os demais valores de sucção investigados, valores relativamente altos de *RMSE* são observados para as sucções de 0.1 e 1 kPa. Vereecken e outros (2010) apontam a baixa precisão de medições experimentais para valores de sucção muito baixos, o que gera falta de dados confiáveis dentro desse intervalo. Aliado a esse fator, a amostragem baixa (47 amostras) gera informação insuficiente para alimentar as *RNAs*. Assim, a umidade volumétrica é interpolada para essas sucções, causando maiores erros para esse trecho da *CRAS*. De fato, a distância na escala logarítmica desses pontos (0.1 e 1 kPa) aos valores de sucção de maior amostragem (0 e 6 kPa) sugere a necessidade de maior discretização da região saturada da *CRAS*. Para h igual a 2 e 4 kPa,

apesar da pequena representatividade dentro do banco de dados, os pontos são próximos a h = 6 kPa na escala logaritmica, o que facilita a interpolação e gera melhores estimativas.

Os maiores erros para as *PC-RNAs* também são observados para as sucções de 300 e 500 kPa, na região seca da *CRAS*. De fato, a extremidade seca da *CRAS*, altamente influenciada pelas forças de adsorção, é difícil de estimar em todos os modelos. Como apontado por Tomasella e outros (2003), o teor de umidade é controlado por diferentes variáveis independentes em diferentes sucções para solos tropicais. Como a argila é predominante na fração de finos dos solos investigados, a mineralogia pode ser importante para a estimativa da *CRAS* para altos valores de sucção.

A análise do modelo *ix* sugere que a utilização da densidade aparente seca do solo (BD) e da densidade dos sólidos (PD) como parâmetros de entrada independentes é útil para explicar a variação da umidade volumétrica em qualquer trecho da *CRAS*, mais do que apenas a porosidade total (n) (modelo *v*). Merece atenção ainda a redução do *RMSE* médio para qualquer trecho da *CRAS* quando analisados o modelo *i* e o modelo *xiv*, evidenciando a influência da adição de parâmetros de entrada para a criação de *RNAs* a partir da abordagem pseudocontínua.

	Sucção (kPa) e número de pontos medidos												
Mod.	Entradas	θ <sub>0</sub>	$\theta_{0.1}$	$\theta_1$	$\theta_2$	$\theta_4$	$\theta_6$	$\theta_{10}$	θ <sub>33</sub>	$\theta_{100}$	θ <sub>300</sub>	$\theta_{500}$	θ1500
		(565)	(47)	(47)	(60)	(60)	(565)	(565)	(565)	(565)	(100)	(237)	(565)
i	%SSC, ln(h)	0.059	0.075	0.062	0.039	0.038	0.048	0.052	0.051	0.048	0.051	0.045	0.047
ii	%SSC, MO, ln(h)	0.047	0.061	0.054	0.036	0.037	0.038	0.042	0.041	0.039	0.046	0.042	0.042
iii	%SSC, PD, ln(h)	0.045	0.057	0.053	0.033	0.031	0.035	0.040	0.037	0.036	0.042	0.037	0.039
iv	%SSC, BD, ln(h)	0.032	0.050	0.049	0.037	0.034	0.036	0.039	0.038	0.036	0.046	0.038	0.039
v	%SSC, n, ln(h)	0.029	0.049	0.044	0.036	0.034	0.035	0.037	0.036	0.034	0.040	0.036	0.038
vi	%SSC, n, MO, ln(h)	0.027	0.049	0.044	0.036	0.032	0.033	0.035	0.033	0.032	0.038	0.033	0.037
vii	%SSC, n, BD, ln(h)	0.027	0.049	0.046	0.032	0.027	0.032	0.033	0.031	0.030	0.036	0.032	0.035
viii	%SSC, n, PD, ln(h)	0.027	0.050	0.046	0.033	0.029	0.033	0.034	0.032	0.031	0.039	0.032	0.036
ix	%SSC, BD, PD, ln(h)	0.027	0.050	0.043	0.031	0.027	0.032	0.034	0.032	0.030	0.039	0.032	0.036
х	%SSC, PD, n, MO, ln(h)	0.027	0.048	0.044	0.030	0.025	0.031	0.031	0.029	0.028	0.033	0.029	0.034
xi	%SSC, BD, PD, n, ln(h)	0.027	0.048	0.046	0.030	0.026	0.031	0.032	0.030	0.029	0.037	0.030	0.034
xii	%SSC, BD, n, MO, ln(h)	0.028	0.049	0.048	0.033	0.029	0.032	0.032	0.030	0.029	0.034	0.030	0.034
xiii	%SSC, BD, PD, MO, ln(h)	0.027	0.050	0.045	0.031	0.027	0.032	0.032	0.030	0.029	0.034	0.030	0.034
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO,ln(h)	0.027	0.047	0.043	0.030	0.024	0.031	0.030	0.028	0.027	0.031	0.027	0.033

Tabela 25 - RMSE médio para as PC-RNAs treinadas com relação a diferentes sucções (h)

## 4.5.3 Desempenho por Classe Textural

A Tabela 26 ilustra o desempenho médio das *PT-RNAs* treinadas para cada classe textural do solo, baseado no triangulo textural *USDA*. O *RMSE* novamente é calculado como a média dos resultados obtidos para as 8 *RNAs* treinadas para cada um dos 14 modelos, totalizando 112 *RNAs*, de forma a ignorar o efeito do número de neurônios na camada escondida. As classes texturais Silte e Franco Siltoso (0 e 1 amostras de solo, respectivamente) não são analisadas.

		Classe Textural e número de amostras											
Mod.	Entradas	Areia	Areia Franca	Franco Arenoso	Franco	Franco Argilo- Arenoso	Franco Argilo- Siltoso	Franco Argiloso	Argila Arenosa	Argila Siltosa	Argila		
		(9)	(3)	(32)	(201)	(68)	(8)	(25)	(38)	(15)	(165)		
i	%SSC	0.022	0.035	0.064	0.042	0.050	0.055	0.097	0.054	0.041	0.059		
ii	%SSC, MO	0.022	0.040	0.057	0.030	0.049	0.055	0.052	0.054	0.038	0.054		
iii	%SSC, PD	0.026	0.023	0.061	0.034	0.049	0.053	0.053	0.052	0.039	0.048		
iv	%SSC, BD	0.022	0.025	0.056	0.030	0.043	0.042	0.041	0.048	0.033	0.049		
v	%SSC, n	0.016	0.025	0.056	0.030	0.043	0.046	0.047	0.044	0.030	0.044		
vi	%SSC, n, MO	0.022	0.030	0.055	0.029	0.043	0.041	0.041	0.044	0.031	0.041		
vii	%SSC, n, BD	0.023	0.022	0.057	0.029	0.042	0.046	0.040	0.041	0.031	0.039		
viii	%SSC, n, PD	0.021	0.024	0.059	0.029	0.042	0.043	0.040	0.042	0.031	0.037		
ix	%SSC, BD, PD	0.019	0.022	0.058	0.029	0.041	0.040	0.041	0.040	0.029	0.036		
х	%SSC, PD, n e MO	0.023	0.023	0.055	0.029	0.042	0.044	0.040	0.041	0.031	0.037		
xi	%SSC, BD, PD, n	0.022	0.023	0.057	0.029	0.042	0.043	0.036	0.041	0.029	0.037		
xii	%SSC, BD, n, MO	0.019	0.024	0.055	0.029	0.041	0.046	0.039	0.040	0.031	0.036		
xiii	%SSC, BD, PD, MO	0.024	0.025	0.055	0.029	0.040	0.039	0.038	0.039	0.030	0.036		
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO	0.025	0.025	0.055	0.029	0.041	0.046	0.038	0.038	0.030	0.036		

Tabela 26 - RMSE médio para as PT-RNAs treinadas com relação à classe textural do solo

Vereecken e outros (2010) sugerem que o percentual de amostras de cada classe textural no conjunto de dados pode afetar o desempenho dos modelos. Haghverdi, Ozturk e Cornelis (2014) associam o bom desempenho da *RNA* para as classes texturais com maior número de amostras utilizadas na modelagem. No entanto, independentemente do modelo, observa-se para este estudo que os menores erros ocorrem para as classes texturais menos representadas no banco de dados Areia e Areia Franca, com *RMSE* médio variando entre 0.016 e 0.030 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>, respectivamente. Isso indica o efeito da mineralogia do solo nos resultados. Por outro lado, a classe Franco Arenoso,

com 32 amostras, apresentou o pior desempenho dentro do banco de dados *HYBRAS*, com *RMSE* médio acima de 0.055 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>. De maneira geral, o maior número de amostras de uma determinada classe não resultou em melhores previsões para as *PT-RNAs*.

Outro ponto a se destacar é a redução do *RMSE* para as *PT-RNAs* com o aumento do número de parâmetros de entrada para a maioria das classes texturais, com exceção da classe Areia. Dessa forma, apenas a distribuição granulométrica parece ser suficiente para estimativa da *CRAS* de solos de granulometria grossa para o banco de dados investigado. Ainda assim, o baixo de número de amostras não permite uma generalização dessa conclusão.

A mesma investigação foi realizada para as *PC-RNAs*, conforme apresenta a Tabela 27. O *RMSE* é calculado como a média dos resultados obtidos para as 12 *RNAs* treinadas para cada um dos modelos, totalizando 168 *PC-RNAs*, o que ignora o efeito do número de neurônios na camada escondida. Os resultados são similares aos da abordagem pontual, com os maiores e menores valores de *RMSE* associados às mesmas classes texturais. Dessa forma, os erros podem estar associados ao formato da *CRAS* para determinadas amostras dentro de uma classe textural, como apontam Haghverdi, Ozturk e Cornelis (2014), ou a anormalidades nos pontos experimentais dentro do conjunto de dados, o que sugere a influência da qualidade do conjunto de dados na precisão dos modelos.

Ignorando o efeito do número de neurônios e das diferentes combinações de entradas, a Figura 33 mostra um comparativo entre as duas abordagens para cada classe textural. As linhas inteira e tracejada representam o *RMSE* calculado como a média dentre todas as *PT-RNAs* e PC-*RNAS*, respectivamente, enquanto as colunas representam o número de pontos experimentais obtidos para cada classe textural. A utilização de um maior número de pontos experimentais pela utilização da abordagem pseudocontínua é observada em todas as classes texturais.

O desempenho das *PC-RNAS* é superior ao das *PT-RNAs* para todas as 10 classes analisadas, o que corrobora com a maior parte das conclusões obtidas neste estudo. A redução do *RMSE* médio varia de 0.5% para a classe textural Areia e chega a 24% para a classe Franco Argilo-Siltoso.
	Entradas	Classe Textural e número de amostras									
Mod.		Areia	Areia Franca	Franco Arenoso	Franco	Franco Argilo- Arenosa	Franco Argilo- Siltoso	Franco Argiloso	Argila Arenosa	Argila Siltosa	Argila
		(9)	(3)	(32)	(201)	(68)	(8)	(25)	(38)	(15)	(165)
i	%SSC	0.022	0.039	0.062	0.039	0.049	0.048	0.087	0.052	0.037	0.054
ii	%SSC, MO	0.025	0.040	0.054	0.030	0.045	0.040	0.045	0.051	0.033	0.047
iii	%SSC, PD	0.027	0.024	0.057	0.031	0.046	0.041	0.039	0.048	0.031	0.038
iv	%SSC, BD	0.020	0.023	0.051	0.028	0.041	0.038	0.034	0.047	0.027	0.041
v	%SSC, n	0.020	0.024	0.050	0.028	0.040	0.035	0.034	0.042	0.028	0.036
vi	%SSC, n, MO	0.020	0.023	0.049	0.027	0.038	0.032	0.031	0.040	0.026	0.033
vii	%SSC, n, PD	0.020	0.023	0.050	0.027	0.039	0.031	0.029	0.038	0.026	0.032
viii	%SSC, n, BD	0.022	0.024	0.048	0.027	0.038	0.032	0.030	0.037	0.024	0.030
ix	%SSC, BD, PD	0.022	0.023	0.050	0.027	0.039	0.032	0.028	0.038	0.025	0.030
х	%SSC, PD, n e MO	0.021	0.022	0.047	0.026	0.035	0.033	0.027	0.036	0.025	0.027
xi	%SSC, BD, PD, n	0.020	0.022	0.049	0.027	0.038	0.027	0.027	0.036	0.024	0.029
xii	%SSC, BD, n, MO	0.021	0.023	0.047	0.026	0.037	0.033	0.028	0.036	0.026	0.030
xiii	%SSC, BD, PD, MO	0.020	0.024	0.048	0.027	0.036	0.029	0.027	0.036	0.027	0.029
xiv	%SSC, BD, PD, n, MO	0.020	0.020	0.046	0.026	0.035	0.032	0.025	0.034	0.025	0.027

Tabela 27 - RMSE médio para as PC-RNAs treinadas com relação à classe textural do solo

Figura 33 - RMSE médio para PT-RNAs e PC-RNAs em relação à classe textural do solo



Fonte: Autor (2020)

#### 4.6 Comportamento de CRAS Limite Superior de Secagem Estimadas

Embora a análise estatística contribua para a análise de desempenho das *RNAs* modeladas, é fundamental analisar graficamente o comportamento das *CRAS* estimadas. A Figura 34 apresenta *CRAS* limite superior de secagem estimadas para seis amostras de solo investigadas nesta pesquisa. Para cada amostra de solo, são plotados os pontos medidos em laboratório, o melhor ajuste dos pontos fornecido pela equação de van Genuchten (1980), e as curvas estimadas por duas *RNAs*: a *PT-RNA* com 20 neurônios para o modelo *ix* [%SSSC, BD e PD] e a *PC-RNA* com 50 neurônios para o modelo *xiv* [%SSC, BD, PD, n, MO, ln(h)]. É de destacar que a *PT-RNA* fornece apenas 6 pontos da curva, enquanto a *PC-RNA* fornece discretização maior da *CRAS* na forma de pontos para diversas sucções.

As abordagens, no geral, mostram boa adesão dos pontos estimados aos pontos experimentais e à curva ajustada pela equação de van Genuchten (1980). Entretanto, a baixa densidade de pontos medidos para a região entre 0.1 e 6 kPa dentro do banco de dados investigado claramente prejudicou as estimativas para esse trecho da *CRAS*. Para a *PC-RNA* analisada, esse trecho é estimado de maneira inconsistente para as amostras 155 e 955, por exemplo, sugerindo situações físicas impossíveis de crescimento no teor de umidade com o aumento da sucção. Conforme discutido anteriormente, observa-se o efeito tanto da quantidade dos dados experimentais medidos para esse trecho da *CRAS*, quanto da qualidade desses dados, considerando as dificuldades associadas à medição da umidade volumétrica para baixos valores de sucção.

Embora apresente vantagens, especialmente relacionadas à capacidade de utilização de um maior conjunto de dados para o seu treinamento, é importante cuidado na utilização da abordagem pseudocontínua. A maior complexidade envolvida na abordagem, em que apenas um neurônio de saída é utilizado, resulta em uma quantidade maior de relações de não-linearidade e de dependência das saídas em relação às entradas. Desta forma, conforme destacam Haghverdi, Cornelis e Ghahraman (2012), a precisão e a confiabilidade das *PC-RNAs* passam por fatores como o número total de amostras de solo, a densidade de pontos medidos ao longo da *CRAS* e o número de propriedades físicas das amostras utilizadas como parâmetros de entrada.



Figura 34 – CRAS limite superior de secagem estimadas pelas *RNAs* desenvolvidas neste estudo para amostras de solo do *HYBRAS* 

Fonte: Autor (2020)

# 5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Este estudo analisou os potenciais fatores que governam a capacidade de previsão de redes neurais artificiais (RNAs) na estimativa da curva de retenção limite de secagem para solos tropicais e subtropicais Brasileiros. Para isso, os dados experimentais hidrofisicos de 565 amostras de solos do banco de dados *HYBRAS* (OTTONI *et al.*, 2018) foram utilizados na criação de diferentes modelos de *RNAs*. Os dados contemplam informações acerca de parâmetros físicos das amostras, como as frações de areia, silte e argila, densidade aparente seca do solo (BD), densidade dos sólidos (PD), porosidade total (n) e teor de matéria orgânica (MO), associados às propriedades hidráulicas desses solos, como os dados de conteúdo volumétrico de água ( $\theta$ ) para diferentes valores de sucção (h). O *HYBRAS* surge como uma base de dados completa e representativa, ideal para o desenvolvimento de funções de pedotransferência (PTFs) aplicáveis para os solos brasileiros.

Conforme os objetivos específicos propostos, os fatores avaliados foram: (1) a influência da topologia das *RNAs*; (2) a influência da geometria das redes, incluindo o número de neurônios e o número de camadas escondidas; (3) a influência da proporção da divisão dos dados entre os conjuntos de treinamento, validação e teste; (4) a influência dos parâmetros de entrada na capacidade de predição das *RNAs*. Duas diferentes topologias foram propostas: (a) a abordagem pontual (PT-RNAs), que estima a umidade volumétrica para valores de sucção pré-definidos; e (b) a abordagem pseudocontínua (PC-RNAs), que estima a umidade volumétrica para qualquer sucção, criando, dessa forma, uma curva discretizada em vários pontos e, por isso, denominada desta forma. Os resultados foram analisados por meio dos parâmetros estatísticos *RMSE* e  $r^2$  e avaliados em relação aos diferentes valores de sucção, possibilitando o estudo dos diferentes trechos da curva, e das diferentes classes texturais representadas no banco de dados.

#### 5.1 Conclusões

A análise dos resultados demonstra influência decisiva de fatores como topologia e geometria da RNA, bem como a escolha apropriada de parâmetros de entrada, que devem incluir propriedades representativas da textura e da estrutura do solo para representar o comportamento hidráulico do solo ao longo de todo a CRAS para os solos tropicais e subtropicais investigados.

A partir dos resultados obtidos para os solos utilizados e os modelos desenvolvidos neste estudo, as análises permitem a consideração de algumas importantes conclusões:

- a) O desempenho das *RNAs* modeladas neste trabalho se mostra promissor e coloca a técnica como potencial ferramenta na estimativa indireta da curva de retenção de secagem para solos tropicais e subtropicais do Brasil. Dentre os diversos cenários analisados, o valor mínimo do *RMSE* foi de 0.035 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para a abordagem pontual e de 0.029 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para a abordagem pseudocontínua. Os resultados são similares aos apresentados na literatura para a utilização de *RNAs* para solos temperados.
- b) Conforme o tópico (a), os resultados demonstram claramente a influência da topologia no desempenho das *RNAs*. Os valores de *RMSE* foram mais baixos para os modelos criados a partir da abordagem pseudocontínua, que se caracteriza pela adição do logaritmo natural da sucção *ln(h)* como parâmetro de entrada, para a maioria dos cenários investigados. A abordagem pseudocontínua facilita a combinação de amostras nos quais a umidade volumétrica foi determinada em diferentes sucções, resultando em um maior conjunto de dados útil para o treinamento e validação do modelo, o que está em contraste com a abordagem pontual. A abordagem é recomendada para a previsão de sucções pré-definidas e para a previsão de um formato contínuo da *CRAS*.
- c) A escolha adequada do número de neurônios na camada escondida está diretamente ligada ao desempenho das RNAs e a sua capacidade de generalização. O número ótimo de neurônios, relacionado aos menores valores de RMSE, variou entre os modelos investigados, mas a utilização de mais do que 35 para as *PT-RNAs* e de mais do que 100 neurônios na camada escondida para as *PC-RNAs*, está ligada ao *overfitting*.

- d) A adição de parâmetros de entrada (isto é, densidade aparente do solo, densidade dos sólidos, porosidade total e teor de matéria orgânica) às frações de argila, silte e areia, gerou diferenças significativas na capacidade de predição das *RNAs* para as duas abordagens. Para as *PT-RNAs*, uma redução do *RMSE* médio próxima a 33% (de 0.054 para 0.036 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>) é obtida quando adicionadas pelos menos duas dessas propriedades. A adição de 3 ou 4 desses parâmetros concomitantemente não resultou em melhor desempenho. Por outro lado, para as *PC-RNAs*, o desempenho melhorou continuamente com a adição de parâmetros, variando de 0.051 para 0.030 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup>, uma melhora de aproximadamente 41% quando todos os parâmetros de entrada são utilizados. Dessa forma, uma **estrutura hierárquica** é sugerida e permite a utilização de amostras de solo com informações limitadas e detalhadas.
- e) Os cenários com mais de uma camada escondida e a utilização de diferentes proporções de dados nos conjuntos de treinamento, teste e validação não surtiram efeitos significativos no desempenho das *RNAs*.
- f) A influência dos parâmetros de entrada nos diferentes trechos da curva também é observada. A análise dos resultados para as diferentes sucções enfatiza a influência da estrutura do solo, representada, principalmente, pela porosidade total e pela densidade do solo, para representação do comportamento hidráulico do solo na região saturada da *CRAS* limite superior de secagem. Da mesma forma, a distribuição granulométrica é indispensável para representação da região seca da curva. Assim, a escolha apropriada dos parâmetros de entrada deve incluir propriedades representativas da textura e da estrutura do solo para representar o comportamento hidráulico do solo ao longo de toda a *CRAS*. Sugere-se ainda, para a abordagem pontual, a utilização de diferentes parâmetros de entrada para previsão dos diferentes trechos da *CRAS*.
- g) O percentual de amostras de cada classe textural no conjunto de dados não afetou a performance das *RNAs*. Os menores erros ocorrem para solos arenosos, apesar da baixa representatividade dentro do banco de dados investigado, e reforça o potencial efeito da mineralogia da fração argilosa na *CRAS*. Para as duas abordagens, a variação do erro das classes texturais é similar e sugere a influência da qualidade e da confiabilidade dos dados experimentais nos resultados. Para a formação do banco de dados HYBRAS, dados provenientes de diferentes métodos experimentais, pesquisadores e laboratórios foram utilizados, o que sugere variabilidade dos erros experimentais associados às medições.

- h) Embora os menores erros observados, as curvas obtidas pela abordagem pseudocontínua ainda resultam em situações impossíveis fisicamente, especialmente pelo baixo número de amostras na região saturada da curva. Assim, a obtenção de *PC-RNAs* confiáveis e precisas passa pela utilização de um banco de dados extenso e consistente, que deve incluir uma quantidade suficiente de número de amostras, alta densidade de pontos experimentais para diferentes sucções e trechos da *CRAS*, e confiabilidade nos dados experimentais.
- i) As duas abordagens utilizadas para as *RNAs* desenvolvidas neste estudo, para as quais o ajuste da *CRAS* é definido a partir do uso de pontos experimentais, possuem a vantagem de não limitar um formato fixo para a *CRAS*, como ocorre para as equações fechadas de van Genuchten (1980), Fredlund e Xing (1994) e Brooks e Corey (1964), por exemplo. Dependendo da discretização, a abordagem pseudocontínua permite ainda a obtenção e a aplicação da CRAS em um formato contínuo.

Para o banco de dados investigado, portanto, a abordagem pseudocontínua se destaca para o desenvolvimento de funções de pedotransferência a partir de *RNAs*. O *RMSE* mínimo para o conjunto de teste foi de 0.029 cm<sup>3</sup>.cm<sup>-3</sup> para o modelo que utiliza como parâmetros de entrada as frações granulométricas de areia, silte e argila (%SSC), a densidade aparente seca do solo (BD), a densidade dos sólidos (PD), a porosidade total (n), o teor de matéria orgânica (MMO) e o logaritmo da sucção ln(h), possui uma camada escondida com 50 a 70 neurônios, aplica a função de ativação tangente sigmóide e o algoritmo de treinamento *Levenberg-Marquardt*, e apresenta a seguinte proporção de divisão dos dados: 70% para o treinamento, 15% para a validação e 15% para o teste.

A indicação de novos parâmetros de entrada, possivelmente relacionados à mineralogia da argila, e a adição de pontos experimentais de retenção de água na faixa de sucção próxima à saturação são fatores importantes e sugeridos para minimização dos erros de previsão. Destaca-se também a limitação desta pesquisa quanto a consideração da histerese da *CRAS*, devido à falta de medições experimentais da *CRAS* de umedecimento das amostras de solo do *HYBRAS*.

Um desafio frente a métodos tradicionais de regressão consiste na dificuldade de difusão dos modelos de *RNAs* criados, compostos por centenas de pesos sinápticos. Assim, o autor se coloca à disposição para compartilhamento dos arquivos criados no ambiente *Matlab*.

Embora este estudo recomende a utilização de *RNAs* para previsão da *CRAS* limite superior de secagem de solos brasileiros, a realização de ensaios ainda se mostra necessária e indispensável para a realização de projetos envolvendo solos não saturados. Além disso, cuidados devem ser tomados na extrapolação dos modelos, e na utilização de amostras de solo de características diferentes das utilizadas nesta pesquisa, o que pode levar a resultados inconsistentes.

#### 5.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

São inesgotáveis as possibilidades de modelos que podem ser desenvolvidos utilizando as *RNAs*. Dessa forma, algumas sugestões são propostas para continuidade deste estudo, como por exemplo:

- Pré-processamento de dados a grande variabilidade e heterogeneidade dos solos sugere a utilização de métodos de agrupamento de dados com similaridades (clusterização), de forma a facilitar a criação de modelos precisos e consistentes. Sugere-se o desenvolvimento de PTFs para dois grupos de solos: um grupo exclusivo para solos tipicamente intemperizados, e outro para os demais solos.
- Implementação das RNAs desenvolvidas neste trabalho pela adição de pontos experimentais de um número maior de amostras de solo, incluindo dados da *CRAS* de umedecimento, e de novas variáveis de entrada (por exemplo, a mineralogia das argilas);
- Otimização dos modelos a partir da consideração de diferentes abordagens, como diferentes algoritmos de treinamento, geometrias e parâmetros estatísticos;
- Alimentar as redes neurais artificiais a partir de dados ajustados por uma equação, como as propostas por van Genuchten (1980) e Brooks e Corey (1964) para a *CRAS*, de forma a fornecer um número maior de dados para treinamento das redes.

### REFERÊNCIAS

AMARI, S. *et al.* Asymptotic statistical theory of overtraining and cross-validation. **IEEE Transactions on Neural Networks**, v. 8, n. 5, p. 985–996, 1997.

ARYA, L. M.; PARIS, J. F. A Physicoempirical Model to Predict the Soil Moisture Characteristic from Particle-Size Distribution and Bulk Density Data. **Soil Science Society of America Journal**, v. 45, n. 6, p. 1023–1030, nov. 1981.

BAKER, R.; FRYDMAN, S. Unsaturated soil mechanics: Critical review of physical foundations. **Engineering Geology**, v. 106, n. 1–2, p. 26–39, maio 2009.

BARBOUR, S. L. Nineteenth Canadian Geotechnical Colloquium: The soil-water characteristic curve: a historical perspective. **Canadian Geotechnical Journal**, v. 35, n. 5, p. 873–894, 1 out. 1998.

BARROS, A. H. C.; VAN LIER, Q. DE J. Pedotransfer Functions for Brazilian Soils. In: **Application of Soil Physics in Environmental Analyses**. Cham: Springer International Publishing, 2014. p. 131–162.

BORGESEN, C. D.; SCHAAP, M. G. Point and parameter pedotransfer functions for water retention predictions for Danish soils. **Geoderma**, v. 127, n. 1–2, p. 154–167, jul. 2005.

BOTULA, Y.-D. *et al.* Evaluation of pedotransfer functions for predicting water retention of soils in Lower Congo (D.R. Congo). Agricultural Water Management, v. 111, p. 1–10, ago. 2012.

BOTULA, Y.-D. *et al.* Prediction of Water Retention of Soils from the Humid Tropics by the Nonparametric k -Nearest Neighbor Approach. **Vadose Zone Journal**, v. 12, n. 2, maio 2013.

BOUMA, J. Using Soil Survey Data for Quantitative Land Evaluation. In: Advances in Soil Science. New York, NY: Springer, 1989. p. 177–213.

BOWDEN, G. J.; DANDY, G. C.; MAIER, H. R. Data transformation for neural network models in water resources applications. **Journal of Hydroinformatics**, v. 5, n. 4, p. 245–258, out. 2003.

BROOKS, R.; COREY, A. Hydraulic properties of porous media. **Hydrology Papers**, Colorado State University, 1964.

CARSEL, R. F.; PARRISH, R. S. Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics. **Water Resources Research**, v. 24, n. 5, p. 755–769, maio 1988.

CHIN, K.-B.; LEONG, E.-C.; RAHARDJO, H. A simplified method to estimate the soil-water characteristic curve. **Canadian Geotechnical Journal**, v. 47, n. 12, p. 1382–1400, dez. 2010.

CYBENKO, G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function. Mathematics of Control, Signals, and Systems, v. 2, n. 4, p. 303–314, dez. 1989.

DAS, S. K. Artificial Neural Networks in Geotechnical Engineering. In: Metaheuristics in Water, Geotechnical and Transport Engineering. [s.l.] Elsevier, 2013. p. 231–270.

DREYFUS, G. Neural Networks. Berlin/Heidelberg: Springer-Verlag, 2005.

DYMINSKI, A. S. **Análise de Problemas Geotécnicos Através de Redes Neurais**. 2000. 193f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2000.

FARAWAY, J.; CHATFIELD, C. Time series forecasting with neural networks: a comparative study using the air line data. Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics), v. 47, n. 2, p. 231–250, 28 jun. 1998.

FLOOD, I.; KARTAM, N. Neural Networks in Civil Engineering. I: Principles and Understanding. **Journal of Computing in Civil Engineering**, v. 8, n. 2, p. 131–148, abr. 1994.

FREDLUND, D. G. Use of the soil-water characteristic curve in the implementation of unsaturated soil mechanics. Proceedings of the 3rd International Conference on Unsaturated Soils. Recife, Brasil, 2002, v.3, p. 887-902.

FREDLUND, D. G. Unsaturated Soil Mechanics in Engineering Practice. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, v. 132, n. 3, p. 286–321, 11 mar. 2006.

FREDLUND, D. G.; RAHARDJO, H. Soil Mechanics for Unsaturated Soils. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 1993.

FREDLUND, D. G.; RAHARDJO, H.; FREDLUND, M. D. Unsaturated Soil Mechanics in Engineering Practice. **Unsaturated Soil Mechanics in Engineering Practice**, n. March, p. 286–321, 2012.

FREDLUND, D. G.; XING, A. Equations for the soil-water characteristic curve. Canadian Geotechnical Journal, v. 31, n. 4, p. 521–532, 1 ago. 1994.

GARDNER, W. R. Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. **Soil Science**, v. 85, n. 4, p. 228–232, abr. 1958.

GITIRANA, G. DE F. N.; FREDLUND, D. G. Soil-Water Characteristic Curve Equation with Independent Properties. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, v. 130, n. 2, p. 209–212, fev. 2004.

GITIRANA JR, G. DE F. N.; MARINHO, F. A. M.; SOTO, M. A. A. A curva de retenção de água de materiais porosos. In: **Solos não-saturados no contexto geotécnico**. 1. ed. São Paulo: Associação Brasileira de Mecânica dos Solos e Engenharia Geotécnica, 2015. p. 759.

HAGHVERDI, A.; CORNELIS, W. M.; GHAHRAMAN, B. A pseudo-continuous neural network approach for developing water retention pedotransfer functions with limited data. **Journal of Hydrology**, v. 442–443, p. 46–54, 2012.

HAGHVERDI, A.; ÖZTÜRK, H. S.; CORNELIS, W. M. Revisiting the pseudo continuous pedotransfer function concept: Impact of data quality and data mining method. **Geoderma**, v. 226–227, n. 1, p. 31–38, 2014.

HAMMERSTROM, D. Working with neural networks. **IEEE Spectrum**, v. 30, n. 7, p. 46–53, jul. 1993.

HAVERKAMP, R.; PARLANGE, J.-Y. Predicting the water-retention curve from particle-size distribution. **Soil Science**, v. 142, n. 6, p. 325–339, dez. 1986.

HAYKIN, S. Neural Networks and Learning Machines. 3rd. ed. Upper Saddle River, New Jersey: Pearson, 2009.

HODNETT, M. G.; TOMASELLA, J. Marked differences between van Genuchten soil waterretention parameters for temperate and tropical soils: a new water-retention pedo-transfer functions developed for tropical soils. **Geoderma**, v. 108, n. 3–4, p. 155–180, ago. 2002.

HORNIK, K.; STINCHCOMBE, M.; WHITE, H. Multilayer feedforward networks are universal approximators. **Neural Networks**, v. 2, n. 5, p. 359–366, jan. 1989.

HUSH, D. R.; HORNE, B. G. Progress in supervised neural networks. IEEE Signal Processing Magazine, v. 10, n. 1, p. 8–39, jan. 1993.

JAIN, A. K.; MAO, J.; MOHIUDDIN, K. M. Artificial neural networks: a tutorial. **Computer**, v. 29, n. 3, p. 31–44, mar. 1996.

KAASTRA, I.; BOYD, M. S. Forecasting futures trading volume using neural networks. Journal of Futures Markets, v. 15, n. 8, p. 953–970, dez. 1995.

LEONG, E. C.; RAHARDJO, H. Review of soil-water characteristic curve equations. Journal of Geotechnical Engineering, v. 123, n. 12, p. 1106–1117, 1997.

LEVENBERG, K. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. **Quarterly of Applied Mathematics**, 1944.

LU, N. Generalized Soil Water Retention Equation for Adsorption and Capillarity. **Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering**, v. 142, n. 10, p. 04016051(1–15), out. 2016.

LU, N. Linking Soil Water Adsorption to Geotechnical Engineering Properties. In: LU, N.; MITCHELL, J. (eds.) Geotechnical Fundamentals for Adressing New World Challenges. [s.l.] Springer Series in Geomechanics and Geoengineering, 2019. p. 93–139.

LU, N.; LIKOS, W. J. Unsaturated Soil Mechanics. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2004.

MAIER, H. R.; DANDY, G. C. Application of Artificial Neural Networks to Forecasting of Surface Water Quality Variables: Issues, Applications and Challenges. In: GOVINDARAJU, R. S.; RAO, A. R. (Eds.). Artificial Neural Networks in Hydrology. Kluwer: Springe, Dordretch, p. 287–309, 2000a.

MAIER, H. R.; DANDY, G. C. Neural networks for the prediction and forecasting of water resources variables: A review of modelling issues and applications. **Environmental Modelling and Software**, v. 15, n. 1, p. 101–124, 2000b.

MAIER, H. R. *et al.* Methods used for the development of neural networks for the prediction of water resource variables in river systems: Current status and future directions. **Environmental Modelling & Software**, v. 25, n. 8, p. 891–909, ago. 2010.

MANRIQUE, L. A.; JONES, C. A.; DYKE, P. T. Predicting Soil Water Retention Characteristics From Soil Physical And Chemical Properties. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, v. 22, n. 17–18, p. 1847–1860, 1991.

MARQUARDT, D. W. An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters. Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics, 1963.

MASROURI, F.; BICALHO, K. V.; KAWAI, K. Laboratory Hydraulic Testing in Unsaturated Soils. **Geotechnical and Geological Engineering**, v. 26, n. 6, p. 691–704, 23 dez. 2008. MASTERS, T. **Practical Neural Network Recipies in C++**. San Diego, CA: AcademicPress, 1993.

MASTERS, T. Practical Neural Network Recipies in C++. San Diego, CA: Academic Press, 1993.

MAY, R. J. et al. Non-linear variable selection for artificial neural networks using partial mutual information. **Environmental Modelling & Software**, v. 23, n. 10–11, p. 1312–1326, out. 2008.

MCCULLOCH, W. S.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. **The Bulletin of Mathematical Biophysics**, v. 5, n. 4, p. 115–133, dez. 1943.

MEDRADO, E.; LIMA, J. E. F. W. Development of pedotransfer functions for estimating water retention curve for tropical soils of the Brazilian savanna. **Geoderma Regional**, v. 1, p. 59–66, set. 2014.

MERMOUD, A.; XU, D. Comparative analysis of three methods to generate soil hydraulic functions. **Soil and Tillage Research**, v. 87, n. 1, p. 89–100, maio 2006.

MINASNY, B.; MCBRATNEY, A. B. The Neuro-m Method for Fitting Neural Network Parametric Pedotransfer Functions . **Soil Science Society of America Journal**, v. 66, n. 2, p. 352–361, 2002.

MINASNY, B.; MCBRATNEY, A. B.; BRISTOW, K. L. Comparison of different approaches to the development of pedotransfer functions for water-retention curves. **Geoderma**, v. 93, n. 3–4, p. 225–253, 1999.

MINNS, A. W.; HALL, M. J. Artificial neural networks as rainfall-runoff models. **Hydrological Sciences Journal**, v. 41, n. 3, p. 399–417, 24 jun. 1996.

MINSKY, M.; PAPERT, S. Perceptron: an introduction to computational geometry. **The MIT Press**, Cambridge, expanded edition, 1969.

MOREIRA DE MELO, T.; PEDROLLO, O. C. Artificial neural networks for estimating soil water retention curve using fitted and measured data. **Applied and Environmental Soil Science**, v. 2015, 2015.

NEJAD, F. P. et al. Prediction of pile settlement using artificial neural networks based on standard penetration test data. **Computers and Geotechnics**, v. 36, n. 7, p. 1125–1133, set. 2009.

NGUYEN, P. M. *et al.* Comparison of statistical regression and data-mining techniques in estimating soil water retention of tropical delta soils. **Biosystems Engineering**, v. 153, p. 12–27, 2017.

OJHA, V. K.; ABRAHAM, A.; SNÁŠEL, V. Metaheuristic design of feedforward neural networks: A review of two decades of research. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, v. 60, n. December 2016, p. 97–116, abr. 2017.

OLIVEIRA, L. B. *et al.* Funções de pedotransferência para predição da umidade retida a potenciais específicos em solos do estado de Pernambuco. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 26, n. 2, p. 315–323, jun. 2002.

OLIVEIRA FILHO, A. G. de. Análise comparativa da estimativa do índice de compressão de argilas por redes neurais artificiais e correlações empíricas. 2019. 203f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFES, Vitória, 2019.

OTTONI, M. V. **Sistema de Classificação dos solos baseado na estrutura do espaço poroso.** 2017. 179f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, COPPE-UFRJ, Rio de Janeiro, 2017.

OTTONI, M. V. *et al.* Hydrophysical Database for Brazilian Soils (HYBRAS) and Pedotransfer Functions for Water Retention. **Vadose Zone Journal**, v. 17, n. 1, p. 170095, 2018.

OTTONI, M. V. *et al.* Pedotransfer functions for saturated hydraulic conductivity using a database with temperate and tropical climate soils. **Journal of Hydrology**, v. 575, p. 1345–1358, ago. 2019.

PACHEPSKY, Y. A.; TIMLIN, D.; VARALLYAY, G. Artificial Neural Networks to Estimate Soil Water Retention from Easily Measurable Data. **Soil Science Society of America Journal**, v. 60, n. 3, p. 727–733, 1996.

PHAM, K. *et al.* Analysis of neural network based pedotransfer function for predicting soil water characteristic curve. **Geoderma**, v. 351, n. May, p. 92–102, 2019.

RAWLS, W. J.; GISH, T. J.; BRAKENSIEK, D. L. Estimating Soil Water Retention from Soil Physical Properties and Characteristics. In: **Communications in Soil Science and Plant Analysis**. [s.l: s.n.]. v. 22p. 213–234.

REICHERT, J. M. *et al.* Estimation of water retention and availability in soils of Rio Grande do Sul. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 33, n. 6, p. 1547–1560, dez. 2009.

RIDLEY, A. M. *et al.* Soil matrix suction: some examples of its measurement and application in geotechnical engineering. **Geotechnique**, v. 53, n. 2, p. 241–253, mar. 2003.

ROSENBLATT, F. The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. **Psychological Review**, v. 65, n. 6, p. 386–408, 1958.

RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning Internal Representations Error Propagation. **Cognitive Science**, v. 1, n. V, p. 318–362, 1986.

SCHAAP, M. G.; BOUTEN, W. Modeling water retention curves of sandy soils using neural networks. **Water Resources Research**, v. 32, n. 10, p. 3033–3040, 1996.

SCHAAP, M. G.; LEIJ, F. J. Using neural networks to predict soil water retention and soil hydraulic conductivity. **Soil and Tillage Research**, v. 47, n. 1–2, p. 37–42, 1998.

SCHAAP, M. G.; LEIJ, F. J.; VAN GENUCHTEN, M. T. Rosetta : a computer program for estimating soil hydraulic parameters with hierarchical pedotransfer functions. **Journal of Hydrology**, v. 251, n. 3–4, p. 163–176, out. 2001.

SHAHIN, M. A. Artificial Intelligence in Geotechnical Engineering. In: YANG, X. et al. (Eds.). **Metaheuristics in Water, Geotechnical and Transport Engineering**. London: Elsevier Inc., 2013. p. 169–204.

SHAHIN, M. A.; MAIER, H. R.; JAKSA, M. B. Data Division for Developing Neural Networks Applied to Geotechnical Engineering. **Journal of Computing in Civil Engineering**, v. 18, n. 2, p. 105–114, abr. 2004.

SHAHIN, M. A.; MAIER, H. R.; JAKSA, M. B. Investigation into the robustness of artificial neural networks for a case study in civil engineering. In: Proceedings of the International Congress on Modeling and Simulation, MODSIM. **Anais...** Melbourne, Australia: 2005

STONE, M. Cross-Validatory Choice and Assessment of Statistical Predictions. Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological), v. 36, n. 2, p. 111–133, jan. 1974.

TAMI, D.; RAHARDJO, H.; LEONG, E. C. Effect of hysteresis on steady-state infiltration in unsaturated slopes. **Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering**, v. 130, n. 9, p. 956–967, 2004.

TOKAR, A. S.; JOHNSON, P. A. Rainfall-Runoff Modeling Using Artificial Neural Networks. Journal of Hydrologic Engineering, v. 4, n. 3, p. 232–239, jul. 1999.

TOMASELLA, J. *et al.* Comparison of Two Techniques to Develop Pedotransfer Functions for Water Retention. **Soil Science Society of America Journal**, v. 67, n. 4, p. 1085–1092, jul. 2003.

TOMASELLA, J.; HODNETT, M. G. Pedotransfer functions for tropical soils. **Developments in Soil Science**, v. 30, n. 4, p. 415–429, 2004.

TOMASELLA, J.; HODNETT, M. G.; ROSSATO, L. Pedotransfer functions for the estimation of soil water retention in Brazilian soils. **Soil Science Society of America Journal**, v. 64, n. 1, p. 327–338, 2000.

VAN GENUCHTEN, M. T. A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. **Soil Science Society of America Journal**, v. 44, n. 5, p. 892–898, set. 1980.

VAN LOOY, K. *et al.* Pedotransfer Functions in Earth System Science: Challenges and Perspectives. **Reviews of Geophysics**, v. 55, n. 4, p. 1199–1256, 28 dez. 2017.

VANAPALLI, S. K.; FREDLUND, D. G.; PUFAHL, D. E. The influence of soil structure and stress history on the soil–water characteristics of a compacted till. **Géotechnique**, v. 49, n. 2, p. 143–159, abr. 1999.

VEREECKEN, H. *et al.* Using Pedotransfer Functions to Estimate the van Genuchten-Mualem Soil Hydraulic Properties: A Review. **Vadose Zone Journal**, v. 9, n. 4, p. 795–820, nov. 2010.

WEYNANTS, M.; VEREECKEN, H.; JAVAUX, M. Revisiting Vereecken Pedotransfer Functions: Introducing a Closed-Form Hydraulic Model. **Vadose Zone Journal**, v. 8, n. 1, p. 86–95, fev. 2009.

WÖSTEN, J. H. . *et al.* Development and use of a database of hydraulic properties of European soils. **Geoderma**, v. 90, n. 3–4, p. 169–185, jul. 1999.

WÖSTEN, J. H. M.; PACHEPSKY, Y. A.; RAWLS, W. J. Pedotransfer functions: bridging the gap between available basic soil data and missing soil hydraulic characteristics. **Journal of Hydrology**, v. 251, n. 3–4, p. 123–150, out. 2001.

YU, H.; WILAMOWSKI, B. M. Levenberg–Marquardt Training. In: **Intelligent Systems**. [s.l.] CRC Press, 2018. p. 12-1-12–16.

ZHOU, A.; HUANG, R.; SHENG, D. Capillary water retention curve and shear strength of unsaturated soils. **Canadian Geotechnical Journal**, v. 53, n. 6, p. 974–987, 12 jun. 2016.

## ANEXOS

#### Anexo A

Código para criação de RNAs de duas e três camadas

% Solve an Input-Output Fitting problem with a Neural Network

% Script generated by Neural Fitting app

% Created 13-Oct-2019 19:03:30

% This script assumes these variables are defined:

% Input\_Train - input data.

% Target\_Train - target data.

x = Input\_Train;

t = Target\_Train;

% Choose a Training Function

% For a list of all training functions type: help nntrain

% 'trainlm' is usually fastest.

% 'trainbr' takes longer but may be better for challenging problems.

% 'trainscg' uses less memory. Suitable in low memory situations.

trainFcn = 'trainIm'; % Levenberg-Marquardt backpropagation.

% Create a Fitting Network hiddenLayerSize = [12 12 12]; %escolha do número de camadas escondidas e da quantidade de neurônios de cada camada. net = fitnet(biddenLayerSize trainEen);

net = fitnet(hiddenLayerSize,trainFcn);

% Choose Input and Output Pre/Post-Processing Functions % For a list of all processing functions type: help nnprocess net.input.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'}; net.output.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing % For a list of all data division functions type: help nndivide net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly net.divideMode = 'sample'; % Divide up every sample net.divideParam.trainRatio = 70/100; net.divideParam.valRatio = 15/100; net.divideParam.testRatio = 15/100;

% Choose a Performance Function % For a list of all performance functions type: help nnperformance net.performFcn = 'mse'; % Mean Squared Error % Choose Plot Functions
% For a list of all plot functions type: help nnplot
net.plotFcns = {'plotperform','plottrainstate','ploterrhist','plotregression', 'plotfit'};

% Train the Network net = init(net); % restart weight connection [net,tr] = train(net,x,t);

% Test the Network output = net(x); e = gsubtract(t,output); performance = perform(net,t,output)

```
% Recalculate Training, Validation and Test Performance
trainTargets = t .* tr.trainMask{1};
valTargets = t .* tr.valMask{1};
testTargets = t .* tr.testMask{1};
trainPerformance = perform(net,trainTargets,output)
valPerformance = perform(net,valTargets,output)
testPerformance = perform(net,testTargets,output)
```

```
% View the Network
view(net);
rtotal = corrcoef(t,output)
```