

RENAN FONSECA NASCENTES

**MODELAGEM DA DINÂMICA DE HERBICIDAS NO SOLO E PALHA UTILIZANDO
REDES NEURAIS ARTIFICIAIS**

Botucatu

2020

RENAN FONSECA NASCENTES

**MODELAGEM DA DINÂMICA DE HERBICIDAS NO SOLO E PALHA UTILIZANDO
REDES NEURAS ARTIFICIAIS**

Tese apresentada à Faculdade de Ciências Agronômicas da Unesp Câmpus de Botucatu, para obtenção do título de Doutor em Agronomia/Proteção de Plantas.

Orientador: Prof. Dr. Caio Antonio Carbonari

Botucatu

2020

N244m	<p>Nascentes, Renan Fonseca</p> <p>Modelagem da dinâmica de herbicidas no solo e palha utilizando redes neurais artificiais / Renan Fonseca Nascentes.</p> <p>-- Botucatu, 2020</p> <p>89 p.</p> <p>Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista (Unesp), Faculdade de Ciências Agrônomicas, Botucatu</p> <p>Orientador: Caio Antonio Carbonari</p> <p>1. dinâmica de herbicidas. 2. palhada. 3. sorção. 4. aprendizado de máquina. 5. inteligência artificial. I. Título.</p>
-------	---

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca da Faculdade de Ciências Agrônomicas, Botucatu. Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

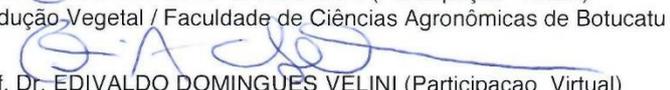
TÍTULO DA TESE: MODELAGEM DA DINAMICA DE HERBICIDAS NO SOLO E NA PALHA DE CANA-DE-AÇÚCAR UTILIZANDO REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS

AUTOR: RENAN FONSECA NASCENTES

ORIENTADOR: CAIO ANTONIO CARBONARI

Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de Doutor em AGRONOMIA (PROTEÇÃO DE PLANTAS), pela Comissão Examinadora:


Prof. Dr. CAIO ANTONIO CARBONARI (Participação Virtual)
Produção Vegetal / Faculdade de Ciências Agrônômicas de Botucatu - UNESP


Prof. Dr. EDIVALDO DOMINGUES VELINI (Participação Virtual)
Produção Vegetal / Faculdade de Ciências Agrônômicas de Botucatu - UNESP


Pesquisadora Dr.^a MARIA MÁRCIA PEREIRA SARTORI (Participação Virtual)
Produção Vegetal / Faculdade de Ciências Agrônômicas de Botucatu - UNESP


Pesquisador Dr. ANTONIO LUIZ CERDEIRA (Participação Virtual)
/ Embrapa Meio Ambiente


Prof.^a Dr.^a MARIA DE LOURDES BUENO TRINDADE GALO (Participação Virtual)
Cartografia / Faculdade de Ciências e Tecnologia - Campus de Presidente Prudente

Botucatu, 06 de outubro de 2020

Para minha amada esposa Marcela e filhas

Laura e Luísa,

dedico.

AGRADECIMENTOS

A Deus.

Ao Prof. Dr. Caio Antonio Carbonari, pela orientação, ensinamentos, paciência e exemplo de professor.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela bolsa de estudos concedida.

Ao Programa de Pós-graduação em Agronomia / Proteção de Plantas, e à Faculdade de Ciências Agronômicas, pela oportunidade e formação.

A meus pais Omar Caixeta Nascentes e Maria Aparecida Fonseca Nascentes, minha irmã Rayane Fonseca Nascentes e meus tios Claudio Lino da Fonseca e Zama Caixeta Nascentes, pelo apoio, incentivo, carinho e dedicação incondicional.

A minha esposa Marcela Cristina Brunelli Nascentes pela ajuda, apoio, paciência e amizade.

Aos amigos do laboratório, Plínio Saulo Simões, Leandro Bianchi, Roque Diais, Vitor Vitor Muller Anunciato, Ana Karollyna Alves de Matos, Gabrielle de Castro Macedo, Ivana Ferraz, Carolina Pucci, Edicarlos Batista de Castro, Ronei Ben, Diego Belapart pelos bons momentos de convívio no Nupam e colaborações para condução das atividades.

Aos amigos e funcionários do Departamento de Proteção Vegetal, José Roberto Marques Silva, José Guilherme Cordeiro, Luis Marcelo Siono pelas colaborações durante a realização dos experimentos e análises laboratoriais.

E a todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a concretização deste trabalho.

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

RESUMO

A compreensão do comportamento ambiental de um herbicida é de extrema importância para garantir a sua aplicação correta, permitindo acertar o momento e a modalidade adequada. Portanto, o desenvolvimento de modelos matemáticos capazes de estimar a transposição do herbicida na palha e sua disponibilidade no solo tem se tornado cada vez mais crucial. Nesse contexto, as redes neurais artificiais (RNAs) têm se mostrado uma abordagem bem-sucedida para modelar relações, especialmente aquelas envolvendo séries temporais e comportamentos não-lineares. Uma das principais vantagens das redes neurais é a sua capacidade de aprendizado por meio de um conjunto de exemplos (padrões), permitindo que posteriormente possam fornecer respostas precisas. Assim, o objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo utilizando redes neurais artificiais para estimar a transposição de diferentes herbicidas na palha, bem como a disponibilidade desses herbicidas no solo. Para o modelo RNA palha, foi utilizado as seguintes variáveis como entradas de dados do modelo: massa molecular, solubilidade em água (mg L^{-1}), pK_a , K_{ow} , pressão de vapor (mmHg), K_{oc} , tonelada de palha por hectare, simulação de chuva (mm) e dose do herbicida em m kg ha^{-1} . O banco de dados foi preparado com 1872 dados que foi aleatoriamente divididos em dois conjuntos: 70% (1310) foram utilizados para o treinamento do modelo, enquanto os 30% restantes (562) foram utilizados para a validação do modelo. Para o modelo RNA solo, a amostra total utilizada consistiu de 124 tipos de solo e 15 herbicidas, totalizando 1860 observações. Também dividimos os dados em conjunto de treinamento, com 1302 amostras, e conjunto de validação, com 558 amostras. As entradas utilizadas para o modelo foram as características físico-química dos herbicidas massa molar, pressão de vapor, solubilidade em água, constante de dissociação (pK_a), coeficiente de partição octanol-água (K_{ow}), meia vida, coeficiente de sorção normalizado para MO (K_{oc}), e do solo área, argila, silte, pH, matéria orgânica, soma de bases (SB), capacidade de troca de cátions (CTC) e percentual da CTC com SB (V%). Para o desenvolvimento da RNA foi utilizado o software estatístico R com o pacote H2O. O treinamento foi feito variando o número de camadas e o número de neurônios em cada camada, e também o número de épocas de aplicação. Como os pesos são elementos iniciados com valores aleatórios, para cada treinamento obteve-se valores diferentes. Desta forma, treinou-se cada rede 10 vezes com a mesma

arquitetura para selecionar o melhor resultado. Na avaliação do desempenho da RNA, utilizou-se 30% dos dados para a validação. Os parâmetros adotados para avaliar o modelo de RNA foram o Erro Quadrático Médio Amostral (EQM), a Raiz do Erro Quadrático Médio (REQM) e o Percentual da Raiz do Erro Quadrático Médio. Quanto menor for esse erro no conjunto de validação, melhor será a arquitetura da RNA associada a ele. Além disso, foram utilizados dois índices de desempenho adicionais: o coeficiente de determinação (r^2) e o índice de confiança (c) para avaliar os resultados obtidos com as RNAs desenvolvidas. O estudo concluiu que todas as arquiteturas de redes neurais tiveram desempenho ótimo, com correlação positiva (r^2) acima de 0,95 em relação aos dados de validação. Destacou-se a arquitetura com 1 camada oculta e 9 neurônios, que proporcionou previsões precisas com baixo REQM de 8,9% para a transposição do herbicida na palha. O modelo de RNA para estimar a disponibilidade de herbicidas no solo também teve resultados promissores, com a arquitetura de três camadas ocultas e mais neurônios permitindo estimativas mais precisas. O percentual de importância na análise indicou que a "dose do herbicida" e a "pressão de vapor" foram cruciais para as previsões na dinâmica do herbicida na palha, enquanto no solo, o pH e a matéria orgânica foram os fatores mais relevantes. A forte correlação entre as estimativas da RNA e os dados de validação demonstra a capacidade de generalização do modelo para novos dados. Essas descobertas têm implicações importantes para a aplicação prática da tecnologia de redes neurais na estimativa da transposição de herbicidas em palha e disponibilidade de herbicida no solo.

Palavras-chave: dinâmica de herbicidas; palhada; sorção; aprendizado de máquina; inteligência artificial.

ABSTRACT

Understanding the environmental behavior of a herbicide is extremely important to ensure its correct application, allowing for the right moment and the appropriate modality. Therefore, the development of mathematical models capable of estimating the transposition of the herbicide in the straw and its availability in the soil has become increasingly crucial. In this context, artificial neural networks (ANNs) have proven to be a successful approach for modeling relationships, especially involving time series and non-linear behavior. One of the main advantages of neural networks is their ability to learn through a set of examples (patterns), allowing them to later provide accurate answers. Thus, the objective of this work is to develop a model using artificial neural networks to estimate the transposition of different herbicides in the straw, as well as the availability of these herbicides in the soil. For the RNA straw model, the following variables were used as model data inputs: molecular mass, water solubility (mg L^{-1}), pka, kow, vapor pressure (mmHg), koc, ton of straw per hectare, rainfall simulation (mm) and herbicide dose in m kg ha^{-1} . The database was prepared with 1872 data that were randomly divided into two sets: 70% (1310) were used for model training, while the remaining 30% (562) were used for model validation. For the ANN soil model, the total sample used consisted of 124 soil types and 15 herbicides, totaling 1860 observations. We also split the data into training set, with 1302 Examples, and validation set, with 558 Examples. The inputs used for the model were characteristics such as physical-chemical characteristics of the herbicides, molar mass, vapor pressure, solubility in water, dissociation constant (pka), octanol-water coefficient (kow), half-life, sorption coefficient normalized for MO (koc), and soil area, clay, silt, pH, organic matter, sum of bases (SB), cation exchange capacity (CEC) and percentage of CEC with SB (V%). For the development of the ANN, the statistical software R with the H2O package was used. Training was done by varying the number of championships and the number of neurons in each layer, as well as the number of times of application. As the weights are elements started with random values, different values were obtained for each training session. In this way, each network was trained 10 times with the same architecture to select the best result. In evaluating the performance of the ANN, 30% of the data were used for validation. The parameters adopted to evaluate the ANN model were the Sample Mean Squared Error (EQM), the Root Mean Squared Error

(REQM) and the Root Mean Squared Error Percentage. The smaller this error in the validation set, the better the architecture of the ANN associated with it. Furthermore, two additional performance indices were used: the coefficient of performance (r^2) and the confidence index (c) to evaluate the results obtained with the developed ANNs. The study concluded that all neural network architectures performed optimally, with a positive r^2 above 0.95 against the validation data. The architecture with 1 hidden layer and 9 neurons stood out, which provided precision with a low REQM of 8.9% for the transposition of the herbicide in the straw. The ANN model for estimating herbicide availability in soil also had promising results, with the three-mode architecture hidden and more neurons allowing for more accurate results. The percentage of importance in the analysis indicated that "herbicide dose" and "vapor pressure" were crucial for predictions of herbicide dynamics in straw, while in soil, pH and organic matter were the most relevant factors. The strong psychology between the ANN estimates and the validation data demonstrates the model's ability to generalize to new data. These findings are important for the practical application of neural network technology in estimating herbicide transposition in straw and herbicide availability in soil.

Keywords: herbicide dynamics; straw; sorption; machine learning; artificial intelligence.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Estrutura geral de cada neurônio biológico.	31
Figura 2 – Composição geral de um neurônio artificial. Fonte: HAYKIN (2001).	34
Figura 3 – Principais funções de ativação. Fonte: SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010	38
Figura 4 – Cartuchos contendo solo saturado com solução dos herbicidas e água. .	54
Figura 5 – Cromatógrafo líquido (Proeminence UFLC) acoplado ao espectrômetro de massas (Triple Quad 3200) – LC-MS/MS.....	55
Figura 6 – Correlação da transposição de herbicidas na palha com os dados de validação simulados com diferentes arquiteturas de rede utilizadas pela rede neural artificial.	65
Figura 7 – Modelo da rede neural artificial para a dinâmica de palha.	66
Figura 8 – Percentual de importância no modelo dos variável de entrada característica físico-químicas herbicida. Dose=dose do herbicida (g i.a ha ⁻¹); Pressão de vapor em (mmHg); pka= constante de dissociação; Palha= quantidade de palha de cana-de-açúcar (ton ha ⁻¹); kow=coeficiente de partição octanol-água; koc=coeficiente de sorção; Solubilidade em água (mg L ⁻¹); Chuva=precipitação de mm.....	68
Figura 9 – Correlação da disponibilidade de herbicidas na solução do solo com os dados de validação simulados pela rede neural artificial.	72
Figura 10 – Modelo da rede neural artificial para disponibilidade de herbicida na solução do solo.	74
Figura 11 – Percentual de importância no modelo dos parâmetros de entrada característica físico-químicas do solo e herbicida. MO=matéria orgânica, SB=soma de bases, CTC=capacidade de troca de cátions, V%= % da CTC com SB, pka= constante de dissociação, kow=coeficiente de partição octanol-água, koc=coeficiente de sorção normalizado para MO.....	76

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Características físico-química dos herbicidas utilizado no modelo de palha.....	50
Tabela 2 – Valor máximo e mínimo das entradas utilizada no modelo de palha.....	51
Tabela 3 – Características físico-química dos herbicidas utilizado no modelo.....	52
Tabela 4 – Valor máximo e mínimo das entradas utilizada no modelo de solo.....	53
Tabela 5 – Interpretação do coeficiente de correlação.	59
Tabela 6 – Critério de interpretação do desempenho dos métodos de estimativa da RNA pelo índice “c”.....	60
Tabela 7 – Número de camadas da rede neural artificial (RNA) e parâmetros de avaliação de desempenho.	63
Tabela 8 – Número de camadas da rede neural artificial (RNA) e parâmetros de avaliação de desempenho.	71

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
2	REVISÃO DE LITERATURA	22
2.1	DINÂMICA DE HERBICIDAS NA PALHA DE CANA-DE-AÇÚCAR	22
2.2	DINÂMICA DE HERBICIDA NO SOLO	25
2.3	REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	29
2.3.1	<i>História das redes neurais artificiais (RNAs)</i>	29
2.3.2	<i>Neurônios biológicos</i>	31
2.3.3	<i>O neurônio artificial</i>	33
2.3.5	<i>Arquitetura e treinamento da rede neural artificial</i>	39
2.3.7	<i>Aplicações das redes neurais na agricultura</i>	47
3	MATERIAL E MÉTODOS	50
3.1	DADOS DE DINÂMICA DE HERBICIDA NA PALHA	50
3.2	DADOS DE DINÂMICA DE HERBICIDA NO SOLO	52
3.3	ARQUITETURA DA RNA PARA SOLO E PALHA	56
3.4	AVALIAÇÃO DOS MODELOS	58
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	62
4.1	MODELAGEM DA DINÂMICA EM PALHA	62
4.2	DISPONIBILIDADE DE HERBICIDA NO SOLO	70
5	CONCLUSÕES	77
	REFERÊNCIAS	79

1 INTRODUÇÃO

A aplicação de herbicidas tem contribuído de maneira considerável para a expansão da agricultura mundial e brasileira, e para o incremento da produtividade das culturas, por diminuir a competição pelos recursos de crescimento das plantas daninhas com as culturas. O aumento na síntese de novas moléculas herbicidas pelas indústrias levou os pesquisadores a uma busca constante por respostas que levem ao melhor entendimento do comportamento desses novos compostos no meio ambiente. Desta maneira, as propriedades químicas e físicas dos agrotóxicos, características abióticas e bióticas do ambiente, bem como métodos de aplicação e as condições climáticas, têm grande influência na atividade do herbicida e no controle das plantas daninhas.

A compreensão do comportamento ambiental de um herbicida é fundamental para a sua correta recomendação, permitindo acertos no momento e modalidade da aplicação, assim como um o ajuste correto da dose, e possibilitando obter a máxima eficácia do defensivo agrícola com os menores impactos negativos, tanto para a cultura quanto para o ambiente.

A dinâmica dos herbicidas no ambiente é influenciada por uma variedade de fatores, incluindo as propriedades químicas e físicas dos herbicidas, as características bióticas e abióticas do ambiente. Além disso, o uso de sistemas de produção baseados em palhadas, como a cana-de-açúcar, pode afetar a dinâmica dos herbicidas, já que eles podem ser transportados pela água das chuvas ou irrigação através da palha.

A transposição de herbicidas na palha da cana de açúcar é influenciada por diversas características físico-químicas dos herbicidas. A solubilidade em água é uma das propriedades que afetam a transposição de herbicidas na palha. Herbicidas solúveis em água são mais facilmente lavados da palha para o solo durante a ocorrência de chuvas.

Além disso, a adsorção em partículas da palha e a volatilidade são outras propriedades físico-químicas que podem influenciar a transposição de herbicidas na palha da cana de açúcar. A adsorção em partículas da palha pode reduzir a quantidade de herbicida que atinge o solo, enquanto a volatilidade pode fazer com que o herbicida evapore da palha e se perca no ambiente.

Compreender as propriedades físico-químicas dos herbicidas e seu impacto na transposição na palha é crucial para escolher os herbicidas e formulações adequadas para controlar plantas daninhas na cultura da cana-de-açúcar. Os herbicidas exibem diferentes comportamentos no solo dependendo da formulação do produto, tipo de solo, condições ambientais e outras variáveis. Portanto, é essencial conhecer esses fatores para aumentar a eficácia do controle de plantas daninhas e minimizar os efeitos prejudiciais dos herbicidas no ambiente e nas culturas subsequentes (MONQUERO et al., 2010).

A capacidade de sorção dos herbicidas no solo está associada às características físico-químicas dos herbicidas, como pressão de vapor, solubilidade, meia-vida, constante de ionização ácida (pKa) e coeficiente de partição octanol-água (K_{ow}), e é um elemento crucial no controle de plantas daninhas (RODRIGUES; ALMEIDA, 2018).

A compreensão do comportamento dos herbicidas no ambiente é fundamental para a sua recomendação correta, permitindo que sejam aplicados no momento certo, na dose correta e com a menor quantidade de impacto negativo possível para o ambiente e as culturas. É por isso que a modelagem matemática se tornou uma ferramenta importante para entender a dinâmica dos herbicidas no ambiente.

Entre as diversas técnicas de modelagem disponíveis, as redes neurais artificiais (RNA) têm se mostrado uma abordagem promissora para prever a dinâmica dos herbicidas no ambiente. As RNA são sistemas paralelos distribuídos que simulam o processamento de informações pelo cérebro humano. Elas são capazes de aprender através de exemplos e fornecer respostas adequadas para dados que não estão no conjunto de exemplos, o que as torna ideais para a modelagem de problemas complexos e não-lineares.

Uma Rede Neural Artificial (RNA) é um modelo computacional que se inspira na estrutura e funcionamento do cérebro humano para processar informações. Ela é composta por camadas de neurônios artificiais interconectados, cada um com uma função específica. Cada neurônio artificial é capaz de receber várias entradas, que são processadas de acordo com uma função de ativação, produzindo uma saída. A saída do neurônio pode ser conectada às entradas de outros neurônios, formando uma rede interconectada de neurônios.

O treinamento de uma RNA envolve a exposição da rede a um conjunto de dados de entrada, que já possuem uma resposta esperada conhecida. Durante o treinamento, a RNA ajusta os pesos de suas conexões para minimizar a diferença entre a resposta produzida pela rede e a resposta esperada. Uma vez treinada, a RNA pode ser usada para fazer previsões ou classificar novos dados de entrada com base no padrão aprendido durante o treinamento.

As RNAs são amplamente utilizadas em diversas áreas, como reconhecimento de fala, visão computacional, processamento de linguagem natural, previsão de séries temporais e até mesmo na agricultura, para prever o rendimento das colheitas, a incidência de pragas e doenças, e otimizar o uso de fertilizantes e irrigação.

O uso de RNA pode ser usado para modelar a dinâmica dos herbicidas no ambiente prevendo a disponibilidade do herbicida no solo e a transposição do herbicida na palha. Na agricultura as redes neurais podem ser usadas para prever a produtividade da safra com base em variáveis como o clima, o solo e o manejo agrícola. Além disso, as redes neurais também podem ser usadas para otimizar o uso de insumos agrícolas, como fertilizantes e pesticidas, de forma a reduzir os custos e minimizar os impactos ambientais. Outra aplicação promissora das redes neurais na agricultura é o monitoramento remoto de culturas. Por meio de imagens de satélite e dados coletados por sensores, as redes neurais podem ser treinadas para identificar padrões nas imagens que indicam o estado da cultura, permitindo aos agricultores monitorar de forma mais eficiente e precisa o crescimento e a saúde das plantas.

O uso da modelagem matemática, incluindo o emprego de RNA é uma abordagem promissora para compreender a dinâmica dos herbicidas no ambiente e aprimorar sua utilização na agricultura. Nesse sentido, o objetivo deste estudo é desenvolver um modelo matemático baseado em redes neurais artificiais e avaliar sua eficácia na estimativa da disponibilidade de herbicidas na solução do solo e na transposição dos herbicidas na palha da cultura da cana-de-açúcar.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 Dinâmica de herbicidas na palha de cana-de-açúcar

A cobertura vegetal é composta por uma variedade de plantas que crescem em um determinado ecossistema. A quantidade e a composição química da cobertura vegetal podem variar de acordo com a região geográfica, o clima e as condições do solo. A cobertura vegetal pode ser composta por gramíneas, leguminosas, arbustos, árvores e outras espécies vegetais.

A palha de cana-de-açúcar é um resíduo agrícola que consiste nas folhas e nos galhos da cana-de-açúcar após a colheita. É um subproduto importante da indústria sucroenergética e é geralmente utilizado como fonte de biomassa para a produção de energia renovável (DOS SANTOS; MASSANARES; DOS SANTOS, 2019).

A utilização da palha de cana-de-açúcar como fonte de energia renovável tem crescido nos últimos anos, especialmente para a produção de bioeletricidade e bioetanol. A palha de cana-de-açúcar é queimada em caldeiras para gerar vapor, que é então usado para acionar turbinas para produzir eletricidade (MERCANTE, 2021). Além disso, a palha de cana-de-açúcar é fermentada para produzir bioetanol, um biocombustível que pode ser usado como substituto da gasolina em motores de combustão interna (SANTOS et al., 2013).

A palhada tem grande influência na dinâmica dos herbicidas aplicados, já que em áreas que possuem maior quantidade de palha o herbicida pode ficar retido, nas camadas superiores da palha, podendo sofrer fotodegradação (FORNAROLLI et al., 1998). A retenção dos herbicidas na palha pode diminuir a transposição por irrigação ou chuva, isto dificulta o acesso do produto ao solo, assim pode reduzir a eficácia no controle de plantas daninhas (REDDY et al., 1995).

De acordo com Araldi et al. (2015), a palha de cana-de-açúcar é capaz de interceptar a maioria dos herbicidas aplicados na cultura, porém a dinâmica desses produtos na palha é influenciada por diversos fatores, como as condições climáticas e a quantidade de palha presente.

A lixiviação de herbicidas na palha da cobertura vegetal pode ser influenciada pela quantidade e pelo período da primeira chuva ou irrigação após a aplicação do produto químico (NEGRISOLI et al., 2007). Quando ocorre uma chuva ou irrigação

logo após a aplicação do herbicida, pode haver uma maior lixiviação do produto químico na palha.

Carbonari et al. (2010) discute os efeitos do período sem chuva na eficácia do herbicida flumioxazin aplicado no solo e na palha de cana-de-açúcar. O estudo foi realizado em condições de campo, e a eficácia do herbicida foi avaliada em diferentes períodos sem chuva após a aplicação. Os resultados indicaram que o período sem chuva após a aplicação do herbicida afetou significativamente sua eficácia, com uma redução no controle de plantas daninhas quando o período sem chuva foi superior a 10 dias. Os autores concluem que é necessário considerar as condições climáticas após a aplicação do herbicida para garantir sua eficácia e sugerem que o uso de flumioxazin em sistemas de produção com palha seja realizado preferencialmente em períodos com previsão de chuva, para evitar perdas de eficácia.

A dinâmica de herbicidas na palha de cana-de-açúcar depende das propriedades químicas do herbicida, como solubilidade em água, coeficiente de partição octanol-água (K_{ow}) e constante de dissociação ácido-base (pK_a). Herbicidas com baixa solubilidade em água e alta afinidade pelo octanol têm maior tendência a se adsorver na palha, enquanto herbicidas com pK_a elevado tendem a ficar mais na forma dissociada e, portanto, mais móveis na palha (MUNDT, 2021).

A persistência do herbicida na palha depende da sua meia-vida, da quantidade aplicada e das condições ambientais, como temperatura e umidade. Alguns herbicidas podem permanecer na palha por longos períodos de tempo, afetando a eficácia de controle de plantas daninhas.

A presença de palhada em áreas onde herbicidas pré-emergentes é aplicado pode interceptar a ação desses produtos, de acordo com alguns estudos realizados Fornarolli et al., 1998; Rodrigues et al., 1998. A quantidade e origem da palhada, bem como a solubilidade e pressão de vapor do herbicida, além da intensidade e época das chuvas após a aplicação, influenciam a retenção dos herbicidas na cobertura morta. Uma vez interceptado pela palha, o herbicida pode sofrer processos como retenção, volatilização, degradação e fotodegradação antes de ser lixiviado para o solo (SELIM et al., 2003). A dinâmica de transporte do herbicida é determinada por diversos fatores, incluindo a quantidade e origem do resíduo, as características do herbicida, as condições climáticas e o tempo decorrido entre a aplicação e a ocorrência de chuva (BANKS; ROBINSON, 1986; CAVENAGHI et al., 2007).

De acordo com Negrisoni et al. (2011), em um estudo com o objetivo de avaliar a eficácia da mistura formulada clomazone + hexazinone no controle de plantas daninhas em áreas de cana-crua sob diferentes condições de cobertura de palha e simulação de chuva, foi constatado que a cobertura de palha e a simulação de chuva afetaram significativamente a eficácia do herbicida. Houve uma redução do controle de plantas daninhas em áreas com maior cobertura de palha e após a aplicação de chuva simulada. Os autores destacam a importância de considerar as condições ambientais e climáticas após a aplicação do herbicida para garantir um controle efetivo de plantas daninhas em sistemas de produção com palha.

Trabalhando o herbicida atrazine Araldi et al. (2014) observou que a transposição do herbicida palha foi de 53% com uma lâmina de 20 mm na palha da cana-de-açúcar. O mesmo autor verificou que para o clomazone houve transposição em 10 t ha⁻¹ de palha de 37% do herbicida para uma lâmina de chuva de 20 mm em 24 horas após a aplicação, já para o pendimethalin não foram verificados traços do herbicida nas amostras, mesmo com as lâminas maiores de chuva de 100 mm.

A transposição de herbicida na palha está ligada as características físico-químicas dos herbicidas. Baixa transposição na palha de herbicidas como pendimethalin e trifluralina pode ser justificada pela baixa solubilidade. Wauchope et al. (1992) demonstraram que a adsorção média de pendimethalin foi aproximadamente 5000 mL g⁻¹, ao passo que o valor para atrazine foi de 100 mL g⁻¹, ou seja, o pendimethalin possui a capacidade 50 vezes maior de adsorção.

De acordo com Tofoli et al. (2009), o estudo realizado sobre a dinâmica do herbicida tebuthiuron em palha de cana-de-açúcar em diferentes condições de chuva demonstrou que a quantidade de palha afeta a transposição do herbicida, e que a utilização de vinhaça como chuva simulada aumentou a lixiviação do tebuthiuron em comparação com a mesma quantidade de chuva simulada com água.

2.2 Dinâmica de herbicida no solo

Diferentes rotas podem ser seguidas pelo herbicida quando aplicado no ambiente, incluindo adsorção, lixiviação, volatilização, fotodegradação e degradação biológica, bem como absorção por plantas daninhas e plantas cultivadas (VELINI, 1992; ROSSI et al., 2005). De acordo com Lavorenti et al. (2003), todas essas rotas podem ocorrer simultaneamente no solo, com intensidades variadas, dependendo das propriedades físico-químicas da molécula, das características físicas, químicas e biológicas do solo, e das condições meteorológicas.

Um fator importante que influencia a disponibilidade do herbicida aplicado no solo é a adsorção-dessorção, que resulta da afinidade das substâncias pela superfície. A adsorção é um dos principais processos que afetam a interação entre o herbicida e a fase sólida do solo, que é composta principalmente por minerais, argila, óxidos e hidróxidos de alumínio e ferro, sílica e matéria orgânica (VIEIRA et al., 1999).

Na solução do solo, as moléculas tendem a alcançar estabilidade entre a fase sorvida e a fase em solução. Para isso, é necessário que haja um equilíbrio entre os processos de dessorção e sorção, uma vez que a eficácia da absorção e transporte do herbicida depende disso. Em geral, quanto maior a sorção do herbicida pelos coloides do solo, menor é sua mobilidade e eficácia. Assim, a sorção do herbicida é influenciada pelas características químicas da molécula do produto e pelas características do solo, como tipo, estrutura, teor de argila, matéria orgânica, pH, temperatura, umidade, área superficial e concentração salina (OLIVEIRA et al., 2005).

A textura do solo, que é composta pelos teores de silte, argila e areia, é uma característica importante na recomendação das doses de herbicidas aplicadas em pré-emergência. A argila é a fração mineral mais relevante para a adsorção no solo, pois possui alta superfície específica (GÉRARD, 2016).

A presença de matéria orgânica é um fator importante na dinâmica dos herbicidas no solo, pois sua alta reatividade está relacionada à presença de vários grupos funcionais, como aminas, carboxilas e hidroxilas, além de estruturas aromáticas e alifáticas elevadas e área superficial específica. De acordo com Ferri et al. (2005), a ligação do herbicida às superfícies lipofílicas da matéria orgânica pode levar à diminuição de sua atividade. A presença de matéria orgânica também pode afetar a adsorção de herbicidas, como foi observado por Oliveira et al. (1998) para o

flumioxazin, sendo que em solos com maiores teores de carbono orgânico, a atividade do herbicida foi reduzida.

O pH do solo também é uma característica importante que influencia a dinâmica dos herbicidas, especialmente para herbicidas ionizáveis. O pKa é uma medida da acidez de um composto químico, que descreve a sua capacidade de doar prótons (H⁺). No contexto dos herbicidas, o pKa é uma característica importante, pois determina se o composto é iônico ou não-iônico em um determinado pH (PREVIDELLO, et al., 2006). Os herbicidas iônicos têm um pKa diferente de zero, o que significa que a sua carga elétrica varia com o pH da solução. Isso afeta a forma como o herbicida é absorvido pelas plantas e se move através do solo. Além disso, os herbicidas iônicos são mais solúveis em água do que os não-iônicos, o que pode afetar a sua persistência no solo (GEBLER; SPADOTTO, 2008).

Por outro lado, os herbicidas não-iônicos têm um pKa próximo a zero e, portanto, não se ionizam em soluções aquosas neutras. Isso significa que eles não são afetados pelo pH do solo e são menos solúveis em água do que os herbicidas iônicos. No entanto, os herbicidas não-iônicos podem ter dificuldade em penetrar nas células das plantas devido à sua baixa solubilidade. O pKa do herbicida é uma característica importante que afeta a sua solubilidade em água, a sua capacidade de ser absorvido pelas plantas e a sua persistência no solo. O conhecimento do pKa é, portanto, importante para a seleção e aplicação eficaz de herbicidas (CHRISTOFFOLETI et al., 2009).

O coeficiente de adsorção no solo (Koc), é um parâmetro utilizado para avaliar a capacidade de adsorção de um herbicida no solo. É uma medida da quantidade de herbicida que é retida no solo em comparação com a quantidade de herbicida que permanece na solução aquosa (PARÁIBA; LUIZ; VIDAL PÉREZ, 2004). Quanto maior o valor de Koc, maior será a adsorção do herbicida no solo e menor será sua mobilidade. O valor de Koc é influenciado por várias características físicas e químicas do herbicida, incluindo sua solubilidade em água, massa molecular, polaridade, carga elétrica e forma da molécula. Também é influenciado pelas características do solo, como o conteúdo de matéria orgânica, pH, textura e capacidade de troca de cátions (NASCIMENTO et al., 2004).

O Koc é um importante parâmetro para avaliar a persistência e mobilidade dos herbicidas no solo. Quanto maior o valor de Koc, menor será a mobilidade do

herbicida no solo e, conseqüentemente, menor será o risco de contaminação de águas subterrâneas e de cursos de água próximos (DE OLIVEIRA et al., 2011).

Quanto menor a adsorção das moléculas do herbicida pelos colóides orgânicos e minerais do solo, maior a concentração na solução e, por conseqüência maior será a disponibilidade do herbicida para ser absorvido pelas plantas presentes. A adsorção forte diminui a lixiviação, a disponibilidade biológica e o movimento do herbicida na água, portanto pode causar o aumento da resistência à degradação (MOREIRA et al., 1995). A lixiviação de um herbicida sofre influência da textura, permeabilidade do solo, do grau de adsorção pelos colóides, pelo volume e fluxo de água e por características físico-químicas das substâncias, e principalmente pela solubilidade em água (OLIVEIRA et al., 1998).

A solubilidade de um herbicida é uma característica importante que influencia sua distribuição e transporte no solo e na água. A solubilidade é definida como a quantidade máxima de uma substância que pode ser dissolvida em um solvente a uma determinada temperatura. A solubilidade do herbicida é afetada por fatores como a estrutura química, a polaridade e a temperatura (DE OLIVEIRA et al., 2011).

Herbicidas com alta solubilidade são mais facilmente transportados na água e podem se mover mais rapidamente através do solo, aumentando o risco de lixiviação. Por outro lado, herbicidas com baixa solubilidade são mais propensos a ficarem retidos no solo e apresentam menor risco de lixiviação. No entanto, uma baixa solubilidade pode dificultar a dissolução do herbicida em solos mais secos, reduzindo sua eficácia (FARIA, 2013).

O coeficiente de partição octanol-água, ou Kow, é uma medida que indica a capacidade de uma substância em se distribuir entre a fase orgânica e a fase aquosa. Ele é frequentemente utilizado para avaliar a persistência e a mobilidade de substâncias químicas no meio ambiente, incluindo herbicidas, pesticidas e produtos químicos industriais. O Kow é definido como a razão da concentração de uma substância em equilíbrio entre as fases octanol e água. Substâncias com Kow maior do que 1 tendem a ser mais solúveis em octanol, que é um solvente orgânico, do que em água, enquanto substâncias com Kow menor do que 1 tendem a ser mais solúveis em água do que em octanol (GEBLER; SPADOTTO, 2008).

Além disso, o Kow também é utilizado em modelos matemáticos para prever a taxa de degradação e a mobilidade de substâncias químicas no meio ambiente. Esses modelos podem ser úteis na avaliação do risco ambiental e na tomada de

decisões relacionadas à gestão ambiental e à regulamentação de produtos químicos. No entanto, é importante destacar que o Kow é apenas um dos muitos fatores que influenciam o comportamento das substâncias químicas no meio ambiente, e outros fatores, como o pH do meio, a presença de outras substâncias químicas e as propriedades físico-químicas do solo e dos sedimentos, também devem ser considerados na avaliação do risco ambiental. (OLIVEIRA; BRIGHENTI, 2011).

Os herbicidas hidrofílicos, geralmente encontram-se em maior concentração na solução do solo, visto que a retenção destes herbicidas pela fração orgânica do solo é menor. No entanto, os herbicidas lipofílicos são mais sorvidos pelos componentes do solo (SILVA et al., 2006). Outro fator que pode diminuir a persistência dos herbicidas no solo é a degradação microbiológica dos herbicidas, pois esta participa como principal mecanismo de decomposição. Isto acontece porque com o aumento do teor de matéria orgânica no solo, umidade, aeração e temperatura do solo regulam a biomassa, atividade e diversidade microbiana do solo, causando assim, possíveis modificações biológicas dos herbicidas ali presentes (WALKER et al., 1992).

A persistência do herbicida no solo pode ter um impacto significativo na sua eficácia. Quando um herbicida é aplicado no solo, ele pode ser absorvido pelas plantas-alvo, mas também pode ser adsorvido por partículas do solo, dissolvido na água do solo ou decomposto por microrganismos do solo. A meia-vida do herbicida é um indicador da sua persistência no solo e representa o tempo necessário para que metade do herbicida aplicado se degrade ou seja eliminado do sistema (GUERRA et al., 2011)

A meia-vida é definida como o tempo necessário para que metade da quantidade inicial de um composto seja degradada ou transformada em outro produto. Essa medida é usada para prever o tempo que o herbicida permanecerá ativo no solo, água ou planta. A meia-vida pode variar amplamente entre diferentes herbicidas, dependendo de sua estrutura química, condições ambientais e atividade microbiana. Alguns herbicidas têm meia-vida curta, de apenas alguns dias, enquanto outros podem persistir no solo por vários meses. Além disso, a meia-vida pode variar em diferentes condições ambientais, como temperatura, umidade, pH do solo, presença de luz solar e atividade biológica (BRUM; FRANCO; SCORZA JÚNIOR, 2013).

2.3 Redes neurais artificiais

2.3.1 História das redes neurais artificiais (RNAs)

A história e evolução das redes neurais artificiais (RNAs) representam uma jornada emocionante de descobertas, desafios e avanços significativos que moldaram o campo do aprendizado de máquina. Desde os primeiros modelos até as arquiteturas mais recentes baseadas em inteligência artificial, a história das RNAs é marcada por marcos importantes que transformaram a forma como processamos informações e abordamos problemas complexos (FINOCCHIO, 2014).

A história das RNAs tem início em meados do século XX, quando o neurofisiologista Warren McCulloch e o lógico Walter Pitts propuseram um modelo computacional inspirado nas redes neurais biológicas do cérebro humano (MCCULLOCH; PITTS, 1943). Esse modelo, conhecido como o "Neurônio de McCulloch-Pitts", estabeleceu as bases conceituais para o desenvolvimento de RNAs. No entanto, o verdadeiro impulso aconteceu em 1957, com o surgimento do Perceptron de Frank Rosenblatt.

O Perceptron foi um dos primeiros modelos de RNA que se tornou popular e promissor para a época. Ele consistia em um único neurônio artificial que podia aprender a realizar classificação linear. Esse marco estimulou o otimismo sobre a possibilidade de criar máquinas que pudessem aprender com a experiência, tornando-se uma ponte entre a biologia e a computação (BOURQUIN et al., 1997).

A revolução veio em meados da década de 1980, com a descoberta do algoritmo de retropropagação (backpropagation, em inglês), que possibilitou o treinamento eficiente de redes neurais de múltiplas camadas. Os pesquisadores Geoffrey Hinton, David Rumelhart e Ronald Williams foram responsáveis por esse avanço fundamental, que reavivou o interesse em RNAs e deu início a uma nova fase de pesquisa e inovação.

A partir de então, as RNAs começaram a ser aplicadas em diversas áreas, desde o reconhecimento de voz e escrita até a visão computacional e o processamento de linguagem natural. Modelos como as Redes Neurais Recorrentes (RNNs), que podiam lidar com sequências temporais, e as Redes Neurais Convolucionais (CNNs), que se mostraram altamente eficientes em tarefas de visão, surgiram como resultados desses esforços (AHMED et al., 2018).

No início dos anos 2000, as redes neurais profundas, compostas por várias camadas, começaram a ganhar destaque. A capacidade desses modelos de aprender representações complexas permitiu um grande avanço em diversas aplicações. O sucesso de redes profundas foi impulsionado pelo aumento da disponibilidade de dados e pelo aumento da capacidade computacional.

Uma das maiores revoluções nas RNAs ocorreu em 2017, com o desenvolvimento das arquiteturas baseadas em Transformers. Essas arquiteturas, que se baseiam em mecanismos de atenção, revolucionaram o processamento de linguagem natural e alcançaram resultados surpreendentes em diversas tarefas (OTTER; MEDINA; KALITA, 2020).

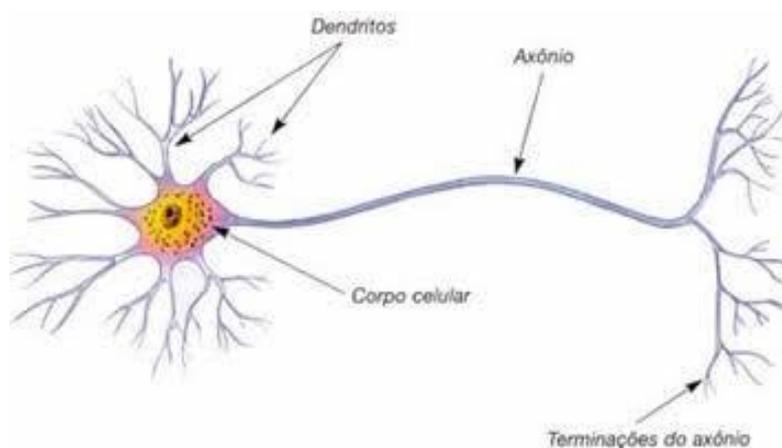
Atualmente, a evolução das RNAs continua com pesquisadores e empresas trabalhando em novas arquiteturas, técnicas de treinamento e aplicações. A inteligência artificial e o aprendizado de máquina baseados em RNAs estão cada vez mais presentes em nossas vidas, desde assistentes virtuais até diagnósticos médicos e condução autônoma (ABIODUN et al., 2018; DARWISH; HASSANIEN; DAS, 2020; JANIESH; ZSCHECH; HEINRICH, 2021).

A história e evolução das redes neurais artificiais testemunharam um percurso notável de desenvolvimento, desde os primeiros modelos até as arquiteturas mais avançadas de inteligência artificial. Cada marco importante abriu novas portas para a aplicação prática das RNAs e conduziu a avanços sem precedentes na forma como interagimos com a tecnologia. À medida que a pesquisa continua, espera-se que as RNAs continuem a desempenhar um papel essencial na resolução de problemas complexos e na evolução contínua do campo do aprendizado de máquina.

2.3.2 Neurônios biológicos

O cérebro do ser humano possui um grande número de neurônios, aproximadamente 100 bilhões. Esses neurônios apresentam três segmentos principais: axônio, dendritos e corpo da célula e (HAGAN et al. 1996). Os dendritos têm a função de receber os impulsos nervosos, vindos dos demais neurônios e dirigi-las ao corpo celular. Neste, a informação é verificada e outros impulsos são gerados. Tais impulsos serão transmitidos a novos neurônios, percorrendo o axônio até chegar nos dendritos dos neurônios mais próximos. A sinapse é o local de contato entre o axônio de um neurônio e os dendritos de outro (BRAGA et al., 2000; HAGAN et al., 1996) (Figura 1).

Figura 1 – Estrutura geral de cada neurônio biológico



Fonte: FURTADO, 2019.

De acordo com Silva (1997), as sinapses transmitem estímulos por meio de diversas concentrações de K^+ (Potássio) e Na^+ (Sódio), desta maneira seus resultados podem ser distribuídos pelo corpo humano todo. Silva (1997) também relata que esta imensa rede possibilita uma fabulosa habilidade de processamento e armazenamento das informações recebidas.

O funcionamento desta rede acontece de forma absolutamente divergente de qualquer computador digital, mesmo considerando um processador de informação profundamente complexo atuando em grande parte do tempo paralelamente (BARRETO, 2009).

Neste contexto, se considerar o conceito numérico binário, se um cérebro humano produzisse apenas uma sinapse, este poderia registrar somente dois estados (1 e 0). Por outro lado, se o mesmo cérebro conduzisse o dobro de sinapses, ele conseguiria efetuar no máximo quatro estados ($2^2 = 4$). Este processo se repete para n sinapses. Com dez sinapses, por exemplo, alcançaríamos surpreendentes 1.024 estados ($2^{10} = 1024$) (TAFNER; FILHO; XEREZ, 1996). Já que ocorrem em torno de 10 bilhões de neurônios (10^{10}) e todos os neurônios são capazes de criar até 10 mil sinapses (10^4) com neurônios próximos, pode-se concluir que no geral, o número de estados que um cérebro humano pode gerar é igual a: $10^{10} \times 10^4 = 10^{14} = 100.000.000.000.000 = 100$ trilhões. (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010)

Redes neurais artificiais e neurônios biológicos são dois conceitos que estão intimamente relacionados. As redes neurais artificiais são modelos computacionais que foram desenvolvidos para simular o funcionamento dos neurônios biológicos (JAIN; MAO; MOHIUDDIN, 1996).

Os neurônios biológicos são células especializadas no processamento de informações. Eles recebem sinais de outras células, processam esses sinais e, em seguida, enviam sinais modificados para outras células. Os neurônios biológicos são altamente complexos e suas funções ainda não são completamente compreendidas (KURZWEIL, R. 2015).

As redes neurais artificiais foram inspiradas no funcionamento dos neurônios biológicos. Elas são compostas por camadas de unidades de processamento chamadas de neurônios artificiais. Cada neurônio artificial recebe entradas de outros neurônios ou de fontes externas, processa essas entradas e, em seguida, envia uma saída modificada para outros neurônios ou para um sistema externo (DE CASTRO; DE CASTRO, 2001).

Uma das principais vantagens das redes neurais artificiais é sua capacidade de aprender a partir de dados. Elas são capazes de modificar suas conexões e ajustar seus pesos para otimizar seu desempenho em uma tarefa específica. Isso é feito por meio de um processo chamado aprendizado de máquina (SUTSKEVER et al., 2013).

O aprendizado de máquina permite que as redes neurais artificiais sejam treinadas em um conjunto de dados para aprender uma função ou padrão específico. Isso é especialmente útil em tarefas de reconhecimento de padrões,

como reconhecimento de fala, reconhecimento de imagens e análise de dados (LIU et al., 2017).

Embora as redes neurais artificiais sejam inspiradas no funcionamento dos neurônios biológicos, elas são simplificações desses sistemas complexos. As redes neurais artificiais são capazes de realizar tarefas específicas de forma eficiente, mas ainda há muito a ser aprendido sobre o funcionamento dos neurônios biológicos e como eles processam informações (SOARES FILHO, 2018).

2.3.3 O neurônio artificial

A história das redes neurais é marcada por diversos avanços e descobertas que permitiram o desenvolvimento e o aprimoramento dessa poderosa técnica de aprendizado de máquina. Um dos marcos mais importantes nessa trajetória foi o trabalho pioneiro de Rosenblatt, que em 1958 concebeu o modelo perceptron, uma rede neural com uma camada de entrada e outra de saída.

O modelo perceptron foi um grande avanço na época, pois permitiu que máquinas pudessem aprender a tomar decisões com base em dados de entrada, assim como os neurônios do cérebro humano. No entanto, seu poder de aprendizado era limitado, e a capacidade de resolver problemas mais complexos ainda era uma meta distante.

Foi somente em 1986 que uma evolução significativa nas redes neurais ocorreu com a proposta do algoritmo de treinamento pela retropropagação do erro, conhecido como (error backpropagation, em inglês). Esse algoritmo foi proposto por Rumelhart e sua equipe, e sua principal inovação foi a possibilidade de treinar redes multicamadas, também conhecidas como MLP (Multi-Layer Perceptrons).

A principal característica das redes MLP é a presença de camadas intermediárias, chamadas de camadas ocultas, entre a camada de entrada e a camada de saída. Essas camadas ocultas permitem que a rede neural aprenda representações hierárquicas e complexas dos dados de entrada, possibilitando assim o processamento de problemas mais desafiadores (PAULA, 2020).

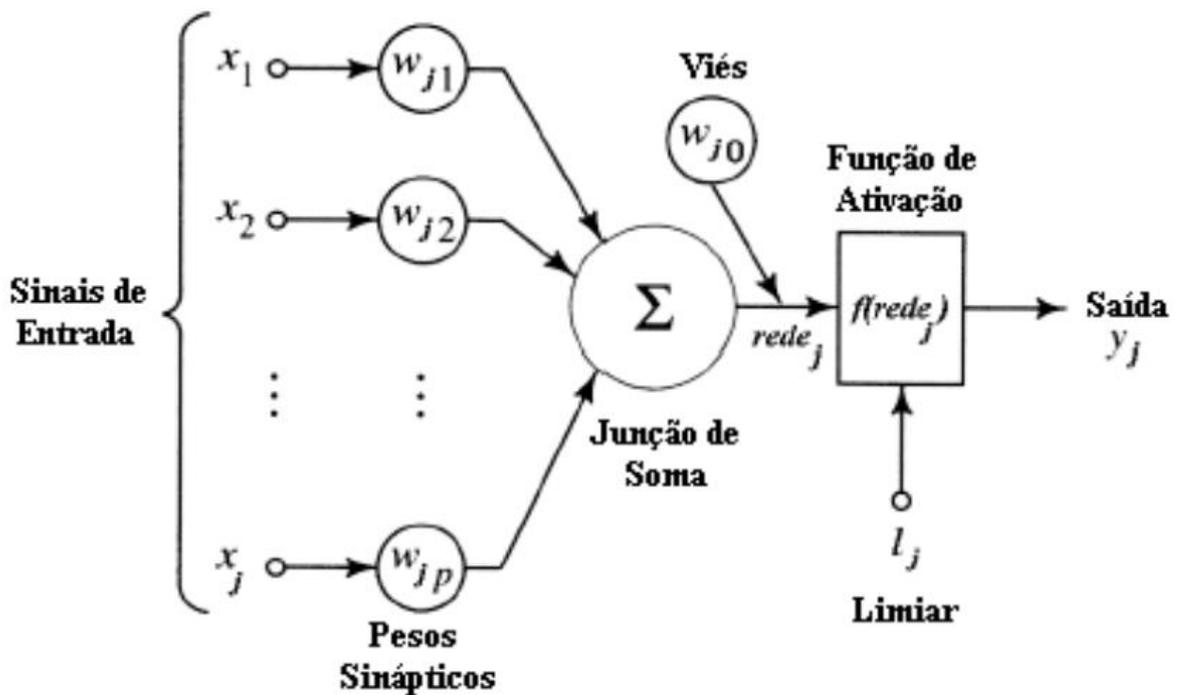
O algoritmo de retropropagação do erro funciona ajustando iterativamente os pesos da rede com base na derivada parcial do erro entre a saída desejada e a saída calculada pela rede. Esse processo de ajuste dos pesos é realizado retroativamente, partindo da camada de saída em direção às camadas ocultas, o

que permite que a rede aprenda a representar e generalizar padrões nos dados de treinamento (SILVA; SCHIMIDT, 2016).

Desde então, as redes neurais têm sido objeto de intensa pesquisa e desenvolvimento, culminando na era atual de aprendizado profundo (deep learning). Com o aumento do poder computacional e o desenvolvimento de novas arquiteturas de rede, as redes neurais têm alcançado resultados impressionantes em diversas tarefas, revolucionando muitos setores e impulsionando o progresso tecnológico de forma exponencial (BEZERRA, 2016).

O modelo do neurônio artificial mais simples inclui as características fundamentais da rede neural biológica, identificando o paralelismo e alta conectividade. Até o momento, esse modelo é o mais utilizado em diversas arquiteturas de redes neurais artificiais (HAYKIN, 2001) (Figura 2).

Figura 2 – Composição geral de um neurônio artificial.



Fonte: HAYKIN (2001).

O neurônio artificial é uma estrutura matemática fundamental para as redes neurais artificiais (RNAs). Ele é inspirado no neurônio biológico e tem como objetivo modelar o processo de tomada de decisão e aprendizagem de um neurônio biológico (FURTADO, 2019).

Esse modelo é composto por diversas variáveis, como os sinais de entrada, os pesos sinápticos, o combinador linear, o limiar de ativação, o potencial de ativação, a função de ativação e o sinal de saída (SREELAKSHMI; RAMAKANTHKUMAR, 2008).

Os sinais de entrada são os valores que o neurônio recebe do meio externo, e são similares aos impulsos elétricos externos que um neurônio biológico recebe pelos dendritos. Os pesos sinápticos ponderam cada variável de entrada da rede e são similares às considerações exercidas pelas associações sinápticas do modelo biológico (FIETE; FEE; SEUNG, 2007).

O combinador linear é responsável por somar todos os sinais de entrada ponderados pelos seus respectivos pesos sinápticos, gerando um valor para o potencial de ativação. Já o limiar de ativação é uma medida que aponta qual será o patamar adequado para que o resultado fornecido pelo combinador linear possa originar um valor de disparo rumo à saída do neurônio (FREEMAN; SKAPURA, 1991).

O potencial de ativação é calculado como a soma do valor produzido pelo combinador linear e o limiar de ativação. A função de ativação é responsável por definir a saída do neurônio dentro de um intervalo de valores aceitáveis a serem classificados pela sua própria imagem funcional. Por fim, o sinal de saída é baseado no valor produzido no final pelo neurônio, relacionado a um conjunto de sinais de entrada específicos (ABREU, 2019).

O modelo de neurônio mais simplificado é considerado um dos mais aplicados em diversas arquiteturas de redes neurais artificiais. Através dele, é possível modelar sistemas de classificação, previsão, reconhecimento de padrões, entre outros. O neurônio artificial é uma ferramenta fundamental para o desenvolvimento de RNAs, permitindo que o sistema aprenda com base em exemplos e possa realizar tarefas complexas de forma automatizada. Seu uso tem se tornado cada vez mais comum em diversas áreas, como na agricultura, medicina, finanças, entre outras.

Na construção de uma rede neural, existem diversos elementos que trabalham em conjunto para gerar um resultado preciso e eficiente. Os sinais de entrada, como “X1, X2, X3, Xj”, são valores que representam informações provenientes do ambiente externo, e que são comparáveis aos impulsos elétricos recebidos pelos dendritos de um neurônio biológico. Esses sinais devem ser representativos das características da aplicação que a rede neural está sendo treinada.

Os pesos sinápticos, representados por “W1, W2, W3, Wj”, são medidas que ponderam cada variável de entrada da rede. Esses pesos são similares às considerações exercidas pelas associações sinápticas presentes no modelo biológico. O combinador linear, representado pela somatória \sum , tem a função de juntar todos os sinais de entrada ponderados pelos pesos sinápticos, a fim de gerar um valor para o potencial de ativação.

O limiar de ativação (bias), representado por “Ij”, é uma medida que aponta qual será o patamar adequado para que o resultado fornecido pelo combinador linear possa originar um valor de disparo rumo à saída do neurônio. O potencial de ativação, representado por u, é o cálculo do somatório do valor produzido pelo combinador linear e o limiar de ativação.

A função de ativação, representada por “f(rede_j)”, tem como objetivo definir a saída do neurônio dentro de um intervalo de valores aceitáveis a serem classificados pela sua própria imagem funcional. O sinal de saída, representado por y, é baseado no valor produzido no final pelo neurônio relacionado a um conjunto de sinais de entrada específicos.

Em 1943, McCulloch e Pitts propuseram uma equação que sintetiza o resultado produzido pelo neurônio artificial. Essa equação, representada pela Equação 1, é fundamental na compreensão do funcionamento da rede neural.

Equação 1: $y = g(\sum(X_i * W_i) + \theta_i)$

$$u = \sum_{i=1}^n X_i \cdot W_i + \theta_i \quad (1)$$

O valor obtido na saída do combinador linear é aplicado à função de ativação $g(u)$, para obter o sinal de saída do neurônio.

$$y = g(u + \theta_i) \quad (2)$$

2.3.4 Função de ativação

As funções de ativação são uma parte crucial das RNAs, pois permitem que os neurônios artificiais produzam uma saída não linear a partir de uma combinação linear das entradas (Figura 3). Em outras palavras, as funções de ativação permitem que as RNAs capturem a complexidade e não linearidade das relações entre as variáveis de entrada (ROMANI, 2017).

Existem diversas funções de ativação utilizadas em RNAs, cada uma com suas próprias características e aplicações. As funções de ativação mais comuns são:

Função de ativação linear: produz uma saída linear em relação às entradas e não introduz não linearidade na rede. É usada principalmente em redes simples de regressão.

A função linear é aplicada para aproximações lineares produz dados de saída iguais aos valores do potencial de ativação (u).

$$g(u) = u \tag{3}$$

Função de ativação sigmoide: produz uma saída entre 0 e 1, com um ponto de inflexão em torno do valor 0. É frequentemente utilizada em redes de classificação binária.

$$g(u) = \frac{1}{1 + e^{-\beta u}} \tag{4}$$

Onde o β é o parâmetro da inclinação da função sigmoide. Se o parâmetro β varia são atingidas funções sigmoides de diversas inclinações (Figura 3). O formato geométrico da função de ativação logística tem a tendência de ser similar a função degrau (Figura 3) quando o parâmetro β for muito levantado (tender ao infinito).

Função de ativação tangente hiperbólica: produz uma saída entre -1 e 1, com um ponto de inflexão em torno do valor 0. É semelhante à função sigmoide, mas pode ser usada em redes com saídas simétricas.

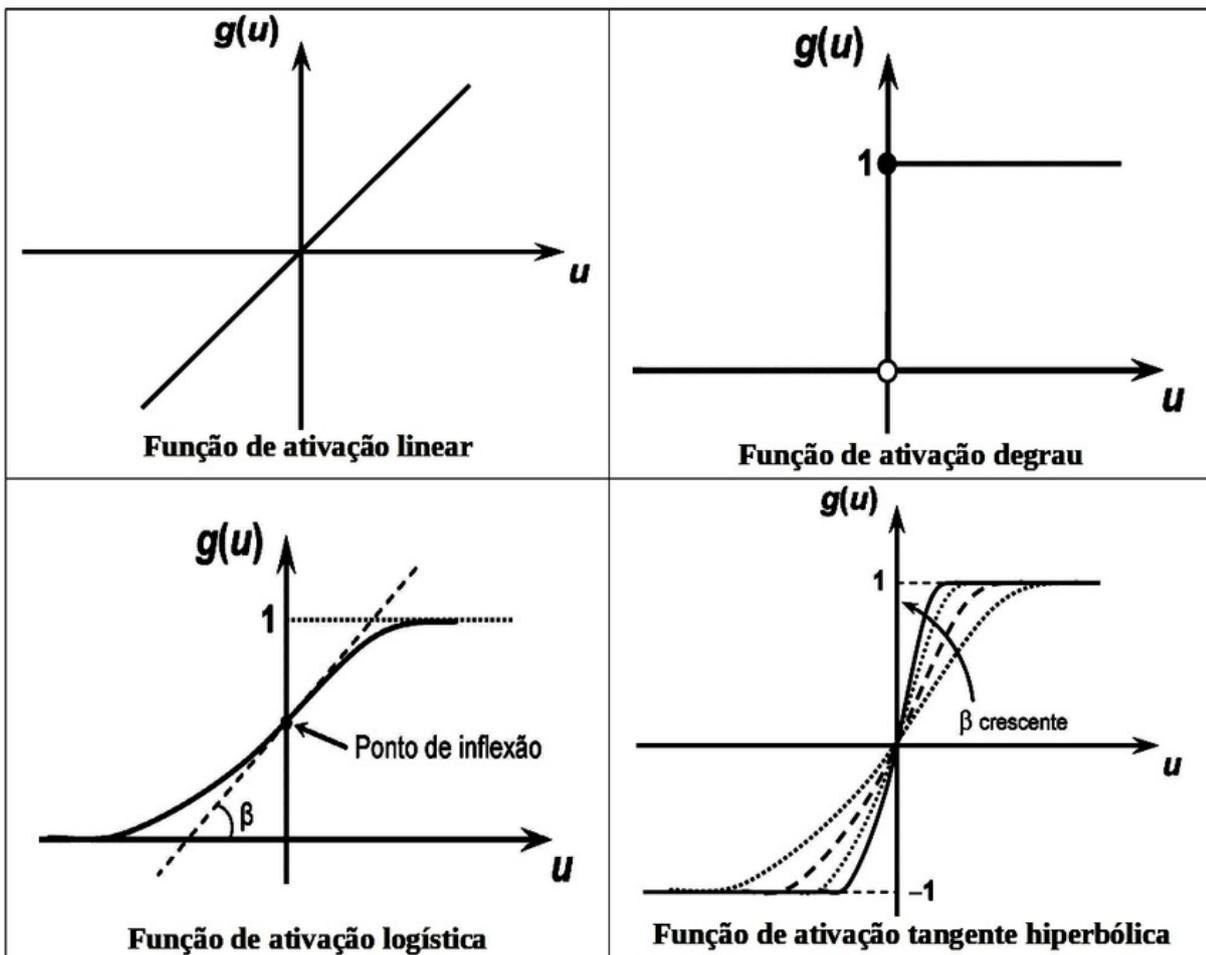
$$g = \frac{1 - e^{-\beta u}}{1 + e^{-\beta u}} \tag{5}$$

Nesta β está relacionado ao grau de inclinação da função tangente hiperbólica em comparação ao seu local de inflexão.

Função de ativação ReLU (Rectified Linear Unit): produz uma saída igual à entrada se esta for positiva, e 0 se for negativa. É uma função não linear que introduz diferença na rede, sendo frequentemente utilizada em redes profundas.

A escolha da função de ativação depende do tipo de problema que está sendo resolvido e da arquitetura da rede. Cada função de ativação tem suas próprias vantagens e desvantagens em relação à capacidade de representação e à estabilidade do treinamento da rede. Portanto, a seleção cuidadosa da função de ativação é importante para obter um desempenho ótimo da RNA.

Figura 3 – Principais funções de ativação.



Fonte: SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010.

2.3.5 Arquitetura e treinamento da rede neural artificial

A arquitetura de uma RNA refere-se à organização e estrutura dos seus componentes, que incluem neurônios artificiais, conexões entre eles e camadas. As RNAs podem ter várias camadas, cada uma composta por um conjunto de neurônios que se comunicam com as camadas adjacentes por meio de conexões ponderadas. As camadas podem ser divididas em camadas de entrada, camadas ocultas e camadas de saída. As camadas de entrada recebem os dados de entrada, as camadas ocultas processam esses dados e as camadas de saída produzem as saídas (SOARES FILHO, 2018).

O treinamento da RNA é o processo pelo qual a rede é ajustada para realizar uma tarefa específica. Durante o treinamento, os pesos das conexões entre os neurônios são ajustados de acordo com um algoritmo de aprendizado, como o retropropagação (MIGUEZ, 2012). O objetivo do treinamento é minimizar a diferença entre as saídas produzidas pela RNA e as saídas desejadas. Para isso, a RNA é alimentada com um conjunto de dados de entrada e as saídas produzidas pela rede são comparadas com as saídas desejadas (FINOCCHIO, 2014). O erro é então propagado pela rede de volta para ajustar os pesos das conexões, com o objetivo de minimizar o erro.

Uma RNA bem treinada é capaz de generalizar para dados que não foram usados durante o treinamento, desde que esses dados sejam semelhantes aos dados de treinamento. Por exemplo, uma RNA treinada para reconhecer imagens de gatos deve ser capaz de reconhecer corretamente novas imagens de gatos que nunca foram vistas antes (JURASZEK et al., 2014).

A arquitetura e o treinamento da RNA são fundamentais para o desempenho da rede. Uma boa escolha de arquitetura, juntamente com um treinamento cuidadoso, pode resultar em uma RNA capaz de realizar tarefas complexas de forma precisa e confiável (XU; SALEH, 2020).

Um fator que afeta diretamente a topologia ou arquitetura da RNA é o questão que será analisado pela rede e, assim, devem ser avaliados as seguintes partes: números de neurônios em cada uma das camadas, quantidade de camadas existentes, e o tipo de conexão entre os neurônios (BRAGA et al., 2000)

A Rede Perceptron Multicamadas (MLP, do inglês Multilayer Perceptron) é um tipo de RNA que consiste em um conjunto de neurônios organizados em camadas.

Essa rede é capaz de aprender e realizar tarefas complexas de classificação, reconhecimento de padrões, previsão e outras aplicações (MANDAL et al., 2008).

A arquitetura MLP é composta por uma camada de entrada, uma ou mais camadas intermediárias (chamadas de camadas ocultas) e uma camada de saída. Cada neurônio em uma camada está conectado a todos os neurônios na camada seguinte por meio de conexões ponderadas. Cada neurônio em uma camada oculta e na camada de saída tem uma função de ativação que transforma a soma ponderada de suas entradas em uma saída não linear (MUBAREK; ADALI, 2017).

O treinamento da MLP é feito por meio do ajuste dos pesos das conexões entre os neurônios. Isso é realizado por um algoritmo de aprendizado supervisionado, como o retropropagação, que utiliza um conjunto de exemplos de entrada e saída esperada para ajustar os pesos da rede e minimizar o erro de saída (MOHAMMED; ARIF; ALI, 2020).

A MLP é amplamente utilizada em áreas como processamento de imagens, reconhecimento de fala, previsão de séries temporais, análise de dados, entre outras. Uma das suas principais vantagens é a sua capacidade de lidar com dados não lineares e complexos. No entanto, o treinamento da MLP pode ser demorado e requer uma quantidade significativa de dados para alcançar um bom desempenho (AGAHIAN; AKAN, 2022).

A MLP é utilizada na resolução de questões não lineares onde a rede neural unidirecional é disposta em camadas, em cada camada tem vários neurônios (BRAGA et al. 2007). Ao se arquitetar uma MLP é fundamental definir o número de neurônios em cada camada e o número de camadas ocultas (TAYEBI et al., 2019).

A uma rede MLP pode ser empregado um conjunto de dados para a solução de diversas questões, utilizando-se o algoritmo de retropropagação do erro (BRAGA et al. 2007). O aprendizado do algoritmo de retropropagação é um processo dinâmico, já que a saída criada pela rede é relacionada a resposta padrão. A saída produzida pela rede especificamente, é subtraída pela saída desejada para gerar uma indicação de erro. Esta indicação de erro é, portanto, conduzido para trás por meio da rede, estabelecendo os pesos sinápticos para que a saída formada pela rede seja adjacente à saída pretendida (NEGROV et al., 2017).

O algoritmo de retropropagação do erro é um dos algoritmos mais utilizados para treinar RNA. Esse algoritmo é usado em redes com múltiplas camadas de neurônios, como a rede MLP, e tem como objetivo ajustar os pesos das conexões

entre os neurônios de forma a minimizar o erro entre a saída da rede e o valor desejado (BUSCEMA, 1998).

O processo de treinamento da RNA começa com a apresentação de um conjunto de dados de treinamento à rede, que fornece uma saída correspondente. O erro é calculado como a diferença entre a saída desejada e a saída real da rede. O algoritmo de retropropagação do erro então calcula a contribuição de cada peso para o erro da saída final da rede, e atualiza os pesos em sentido contrário à propagação do sinal (retropropagação), ou seja, começa pela camada de saída e vai até a camada de entrada.

O algoritmo de retropropagação do erro utiliza o gradiente descendente para minimizar o erro da rede. O gradiente descendente é um método de otimização que ajusta os pesos da rede de forma a minimizar uma função de custo, que representa o erro da rede em relação aos dados de treinamento. O algoritmo de retropropagação do erro usa a derivada da função de custo em relação aos pesos da rede para ajustar os pesos de forma a minimizar a função de custo (TSAI; LEE, 1999).

O treinamento da rede com o algoritmo de retropropagação do erro pode levar várias iterações, ou épocas, dependendo da complexidade do problema e do tamanho da rede. Durante o treinamento, a rede ajusta os pesos das conexões de forma a minimizar o erro na saída da rede. Quando o erro na saída da rede para o conjunto de dados de treinamento é suficientemente pequeno, o treinamento é considerado concluído (LEE, 2004).

O algoritmo de retropropagação do erro é um método poderoso para treinar redes neurais artificiais, e tem sido utilizado em uma ampla variedade de aplicações, incluindo reconhecimento de padrões, processamento de sinais, previsão de séries temporais, entre outras. No entanto, ele pode apresentar problemas de convergência em redes muito profundas, e outras técnicas de treinamento, como redes adversárias generativas (GANs) e redes convolucionais profundas (CNNs), têm sido propostas para lidar com esses desafios (LUO; HUANG; LI, 2021).

O conjunto de dados de treinamento de uma RNA é composto por um conjunto de exemplos que serão utilizados para ensinar a rede a realizar uma tarefa específica. Esses exemplos são compostos por dados de entrada e saída esperada, ou seja, a rede recebe um conjunto de valores como entrada e produz uma saída

correspondente que deve se aproximar o máximo possível da saída esperada (LUDERMIR, 2021).

O objetivo do treinamento é ajustar os pesos sinápticos da rede de forma que a saída produzida pela rede seja próxima da saída esperada para todos os exemplos de treinamento. O processo de treinamento é feito iterativamente, em que a rede é alimentada com cada exemplo de treinamento, calcula-se o erro entre a saída produzida pela rede e a saída esperada, e ajusta-se os pesos sinápticos para minimizar esse erro (MIA et al., 2015).

O conjunto de dados de treinamento deve ser representativo da tarefa que se deseja que a rede aprenda e deve conter exemplos que representem todas as possíveis variações e situações que a rede pode encontrar. Além disso, é importante ter um conjunto de dados de validação para avaliar o desempenho da rede durante o treinamento e evitar o sobreajuste (*overfitting*, em inglês), que ocorre quando a rede se ajusta demasiadamente aos dados de treinamento e não generaliza bem para dados não vistos anteriormente (LIM, 2021).

O conjunto de treinamento é extremamente importante, pois representa os dados que serão empregados como entrada e aplicados no aprendizado da RNA. Tais informações são fonte do conhecimento da rede e todas as pesquisas que a mesma for capaz de realizar são dependentes do seu aprendizado (TAFNER et al, 1996).

Giriolo e Ribeiro (2009) relataram que aproximadamente 50 a 90% do total de dados são destinados para o treinamento da rede neural, dados estes definidos aleatoriamente, de modo que a rede "aprenda" as normas associadas ao processo. O resto das informações só é apresentada à rede neural na etapa de testes para que esta consiga "deduzir" adequadamente o inter-relacionamento entre os dados.

O método supervisionado é o mais utilizado no treinamento das RNAs e recebe este nome pelo fato de as entradas e saídas esperadas serem fornecidas para a rede através de um supervisor externo. O resultado é o ajuste dos parâmetros da rede, de modo que se encontra a ligação entre os pares de entrada e saída. A rede tem sua saída corrente relacionada a saída desejada, recebendo dados do supervisor sobre o erro da resposta atualizada, e a cada padrão de entrada a rede relaciona a resposta desejada ajustando os pesos das conexões para reduzir ao máximo o erro (BRAGA et al., 2000).

Aprendizado supervisionado e não supervisionado são duas abordagens distintas em aprendizado de máquina. O aprendizado supervisionado envolve a utilização de um conjunto de dados de treinamento que contém exemplos rotulados, ou seja, cada exemplo no conjunto de dados possui uma resposta conhecida ou uma variável de destino. A RNA é treinada para aprender a relação entre as entradas e as saídas rotuladas, de modo que, quando apresentada a novos dados, a RNA é capaz de fazer previsões precisas com base nas entradas (WIDROW; HOFF, 1960; RUMELHART, et al., 1986).

Por exemplo, se quisermos criar um modelo de RNA que possa prever a temperatura com base na hora do dia e na umidade relativa, podemos coletar um conjunto de dados de treinamento que inclua várias observações dessas variáveis, juntamente com a temperatura real. A RNA é treinada para mapear as variáveis de entrada para a temperatura real, de modo que possa prever a temperatura para novos conjuntos de dados.

Já o aprendizado não supervisionado envolve a utilização de um conjunto de dados de treinamento não rotulado. A RNA é treinada para encontrar padrões ou estruturas ocultas nos dados, sem uma variável de destino explícita. Isso é útil quando não sabemos exatamente o que estamos procurando ou quando queremos descobrir relações ocultas nos dados (COSTA; BRANDÃO, 2023).

As redes de aprendizado não supervisionado aprendem com dados de entrada específicos, sem a necessidade de dados de saída. Um exemplo é a rede Kohonen (BRAGA et al., 2000). Essas redes estabelecem um equilíbrio com as regularidades estatísticas dos dados de entrada, permitindo a formação de representações internas para codificar informações intrínsecas da entrada e gerar automaticamente novas classes ou grupos. Esse tipo de aprendizado é viável quando há repetição nos dados de entrada, pois sem ela seria impossível identificar modelos ou particularidades nos dados (HAYKIN, 2001; BRAGA et al., 2000).

Por exemplo, podemos usar o aprendizado não supervisionado para segmentar clientes em grupos com base em padrões de comportamento de compra. A RNA seria treinada para encontrar agrupamentos naturais nos dados, sem a necessidade de um rótulo explícito para cada grupo (DUARTE JUNIOR; ESTENSSORO; LIMA, 2021).

Aprendizado supervisionado é útil quando temos um objetivo claro em mente e um conjunto de dados rotulados para treinar a RNA, enquanto o

aprendizado não supervisionado é útil quando queremos explorar os dados para encontrar relações ocultas ou agrupamentos naturais (NEVES, 2012).

2.3.6 Validação de uma Rede Neural Artificial

A avaliação do desempenho de uma RNA é uma etapa importante no processo de construção e aplicação desses modelos. Existem diversas métricas que podem ser utilizadas para avaliar a qualidade do modelo, dependendo do tipo de problema e dos objetivos da análise.

Uma das métricas mais comuns é o erro quadrático médio (EQM), que mede a diferença entre os valores previstos pela RNA e os dados de validação do conjunto de dados utilizado para o validação do modelo. Quanto menor o EQM, melhor o desempenho da RNA em relação aos dados de treinamento. No entanto, é importante avaliar também o desempenho do modelo em dados que não foram utilizados no treinamento, para evitar o sobreajuste e garantir que o modelo seja capaz de generalizar para novas situações (GOULART FARIAS et al., 2022).

A raiz do erro quadrático médio (REQM) é uma outra métrica que representa a média das diferenças entre os valores preditos e os dados de validação. A REQM é importante porque ela nos dá uma medida de quanto erro podemos esperar do modelo em termos da unidade de medida dos dados de validação. Por exemplo, se estamos lidando com dados que possuem uma escala de medida específica (como temperatura em graus Celsius), a REQM nos dá uma ideia de quanto podemos esperar que o modelo erre em termos de graus Celsius (SILVA et al, 2021).

O percentual da raiz do erro quadrático médio (REQM) é uma métrica que representa o erro relativo do modelo. Essa métrica é importante porque nos permite comparar o desempenho de diferentes modelos em diferentes conjuntos de dados. Por exemplo, se estamos comparando dois modelos que possuem desempenhos diferentes em termos de REQM, o percentual da REQM nos dá uma medida de quão mais eficiente é um modelo em relação ao outro (CUNHA, 2022).

Desta forma quanto menor forem as métricas de EQM, REQM e REQM%, melhor é o desempenho do modelo de RNA. No entanto, é importante lembrar que essas métricas não são as únicas a serem consideradas na avaliação do desempenho de uma RNA.

A correlação de Pearson é uma medida estatística que avalia a relação linear entre duas variáveis. É uma técnica comumente usada para validar modelos de RNA, especialmente aqueles que envolvem previsões de valores numéricos.

A correlação de Pearson é calculada a partir do coeficiente de correlação, que varia de -1 a 1. Um valor de -1 indica uma correlação negativa perfeita, ou seja, quando uma variável aumenta, a outra diminui na mesma proporção. Um valor de 1 indica uma correlação positiva perfeita, ou seja, quando uma variável aumenta, a outra também aumenta na mesma proporção. Um valor de 0 indica que não há correlação linear entre as duas variáveis (GUIMARÃES, 2017).

Na validação de uma RNA, a correlação de Pearson pode ser usada para avaliar a relação entre os valores observados e os valores previstos pelo modelo. Um valor de correlação alto indica que o modelo é capaz de prever os valores com precisão. Por outro lado, uma correlação baixa indica que o modelo não é capaz de prever os valores com precisão e precisa ser ajustado (SOARES et al., 2015).

É importante notar que a correlação de Pearson não é uma medida completa de validação do modelo de RNA. Outras métricas, como o EQM, REQM e %REQM também devem ser consideradas em conjunto com a correlação de Pearson para avaliar o desempenho do modelo de RNA.

O índice de confiança (c) foi proposto por Camargo e Sentelhas em 1997 é calculado multiplicando o coeficiente de correlação (r) e o índice de concordância (d), que está relacionado ao desvio dos valores estimados em relação aos valores observados, como proposto por Willmott et al. em 1985.

O coeficiente de correlação (r) mede a força da relação linear entre duas variáveis, neste caso, os valores estimados e observados do modelo RNA. Varia de -1 a 1, sendo que valores mais próximos de 1 indicam uma correlação positiva mais forte e valores mais próximos de -1 indicam uma correlação negativa mais forte. Um coeficiente de correlação de 0 indica que não há relação linear.

Por outro lado, o índice de concordância mede a concordância entre os valores estimados e observados, independentemente de sua magnitude. Varia de 0 a 1, sendo que valores mais próximos de 1 indicam um maior grau de concordância entre os dois valores. Um índice de concordância de 0 indica que não há concordância entre os valores.

Ao multiplicar o coeficiente de correlação e o índice de concordância, o índice de confiança fornece uma medida geral da precisão do modelo RNA. Um alto índice

de confiança indica uma forte relação linear e alta concordância entre os valores estimados e observados, enquanto um baixo índice de confiança indica o oposto.

Portanto, o índice de confiança (c) proposto por Camargo e Sentelhas é uma métrica útil para avaliar a precisão e confiabilidade dos modelos RNA, pois considera tanto a força da relação linear quanto a concordância entre os valores estimados e observados.

Para isso, é comum separar o conjunto de dados em dois grupos: um conjunto de treinamento, utilizado para ajustar os parâmetros do modelo, e um conjunto de validação, utilizado para avaliar o desempenho do modelo em dados não vistos anteriormente. Uma abordagem comum é monitorar o erro quadrático médio na validação à medida que o treinamento avança, ajustando os parâmetros do modelo para minimizar esse erro.

Um conjunto de treinamento é um conjunto de dados usado para ajustar os parâmetros de um modelo de RNA, enquanto um conjunto de validação é um conjunto de dados separado usado para avaliar a performance do modelo após o ajuste dos parâmetros. O conjunto de treinamento é usado pelo algoritmo de treinamento para encontrar os pesos ideais que minimizam o erro na previsão dos dados de treinamento. O conjunto de validação é então usado para avaliar o desempenho do modelo em dados não vistos durante o treinamento e ajustar o modelo para evitar o sobreajuste.

O uso de conjuntos de treinamento e validação é essencial para garantir que um modelo de RNA generalize bem e seja capaz de prever com precisão novos conjuntos de dados. Sem um conjunto de validação, pode haver o risco de sobreajuste, onde o modelo se ajusta excessivamente aos dados de treinamento e não generaliza bem para novos dados. O conjunto de validação ajuda a identificar o momento ideal de parar o treinamento do modelo para evitar sobreajuste e garantir que ele seja capaz de prever com precisão novos dados (BORGES et al., 2023).

Sobreajuste em uma RNA ocorre quando o modelo é ajustado excessivamente aos dados de treinamento, perdendo sua capacidade de generalização para novos dados. Ou seja, a RNA se torna muito específica para os dados de treinamento e não é capaz de se adaptar a novos dados que possam ser diferentes do conjunto de treinamento (NISSILA, 2023).

Isso pode acontecer quando o modelo é muito complexo em relação ao conjunto de dados de treinamento, ou quando o conjunto de dados de treinamento é

muito pequeno em relação à complexidade do modelo. O sobreajuste é um problema comum em modelos de RNA e pode ser identificado por meio de métricas de validação, como a avaliação do erro de predição em um conjunto de dados de validação.

Para evitar o sobreajuste, técnicas como a regularização, redução de dimensionalidade, aumento de dados e validação cruzada podem ser aplicadas. A regularização, por exemplo, adiciona um termo de penalização aos parâmetros do modelo para evitar que eles cresçam demais, limitando a complexidade do modelo. Já a redução de dimensionalidade pode ser usada para reduzir a quantidade de entradas e, assim, diminuir a complexidade da RNA. O aumento de dados consiste em gerar novos dados a partir dos dados existentes para expandir o conjunto de treinamento. E a validação cruzada é uma técnica para avaliar o desempenho do modelo em diferentes subconjuntos de dados, o que pode ajudar a identificar o sobreajuste (SANTOS; PAPA, 2022).

2.3.7 Aplicações das redes neurais na agricultura

As redes neurais têm se tornado uma ferramenta cada vez mais relevante na agricultura, uma vez que permitem a análise e previsão de variáveis complexas e interdependentes. Dentre as principais aplicações das redes neurais na agricultura, destacam-se a predição de produção de grãos, frutas e hortaliças, identificação de doenças em plantas, classificação de imagens de satélite, estimativa de contaminação do solo, estimativa da erosão espacial de solos e controle de robôs agrícolas (ANGELICO, 2005; NAIME et al., 2014; CHEMURA, 2017; KHANAL; FULTON; SHEARER, 2017; GHOSH; KUMPATLA, 2022).

Por meio da análise de diversas variáveis, como clima, solo e histórico de produção, as redes neurais podem prever a produção de diferentes culturas com grande precisão. Além disso, as redes neurais também podem ser treinadas para identificar padrões em imagens de plantas, permitindo um diagnóstico mais rápido e preciso de doenças (SLADOJEVIC et al., 2016; FUENTES et al., 2018; COULIBALY et al., 2019; JIANG et al., 2019).

Outra aplicação relevante das redes neurais na agricultura é a classificação de imagens de satélite, que permite a identificação de áreas de plantio e monitoramento da expansão urbana. Além disso, as redes neurais também podem ser utilizadas na estimativa da contaminação do solo, permitindo um monitoramento

mais eficiente da qualidade do solo e na estimativa da erosão espacial de solos, possibilitando a adoção de medidas preventivas para minimizar os impactos ambientais (XIE; ZHANG; XUE, 2019; NGUYEN et al., 2020).

As redes neurais podem ser usadas no controle de robôs agrícolas, permitindo a automação de tarefas como colheita, pulverização e irrigação. Essa automação torna as atividades mais eficientes e precisas, além de reduzir custos e minimizar os impactos ambientais (TANG et al. 2011; MCCOOL; PEREZ; UPCROFT, 2017).

As redes neurais têm sido utilizadas para identificar e classificar plantas daninhas em áreas agrícolas, permitindo um controle mais eficiente e sustentável. A partir de imagens digitais de plantas, as redes neurais podem ser treinadas para reconhecer padrões específicos de cada espécie de planta daninha, permitindo uma identificação precisa e automática (KAMILARIS, 2018; PRENAFETA-BOLDÚ, RAKHMATULIN; KAMILARIS; ANDREASEN, 2021).

Os modelos de redes neurais podem ser treinados com diferentes tipos de imagens, como fotografias de campo, imagens aéreas e imagens capturadas por drones. Com o avanço das tecnologias de sensoriamento remoto, a identificação automática de plantas daninhas tem se mostrado uma ferramenta cada vez mais viável e importante na agricultura de precisão (ŠEVO; AVRAMOVIĆ, 2016; MAGGIORI et al., 2017).

Um estudo realizado por Soares et al. (2014) utilizou redes neurais artificiais para estimar a retenção de água do solo. Os pesquisadores coletaram dados de campo e de laboratório para treinar as redes neurais e avaliar sua precisão na estimativa da retenção de água do solo. Os resultados mostraram que as redes neurais artificiais foram capazes de estimar com precisão a retenção de água do solo, superando os modelos matemáticos tradicionais.

A utilização de redes neurais artificiais na estimativa da retenção de água do solo apresenta diversas vantagens, como a capacidade de lidar com grandes quantidades de dados e a habilidade de reconhecer padrões complexos. Além disso, essas redes são capazes de aprender com experiências passadas, tornando-se mais precisas e eficientes ao longo do tempo (SOARES et al. (2014).

As redes neurais têm uma ampla gama de aplicações agronômicas, abrangendo diversas áreas dentro da agricultura. Dentre as aplicações mais comuns, destacam-se o mapeamento de macrófitas por imagens de satélite

(ESPINHOSA; GALO, 2004; CRUZ; GALO, 2005), a predição de produção em grãos (JI, 2007), a seleção em populações de seedling em cana-de-açúcar (ZHOU et al., 2011), a previsão de características complexas em vacas da raça Jersey e trigo (GIANOLA et al., 2011), a modelagem da resistência à penetração no solo (SANTOS, 2012), a avaliação da adaptabilidade e estabilidade em genótipo de alfafa (NASCIMENTO et al., 2013), a identificação de algumas doenças em plantas (ASEFPOUR VAKILIAN; MASSAH, 2013), a estimativa da população de microrganismos no solo (EBRAHIMI et al., 2017), a classificação de imagens de satélite (HASSAN-ESFAHANI et al., 2017; SAMMOUDA et al., 2014; MAEDA et al., 2009), a avaliação de contaminantes orgânicos e inorgânicos do solo (BONELLI et al., 2017), a estimativa da erosão espacial de solos (GHOLAMI et al., 2018), e ainda no controle de robôs (CAMCI et al., 2018).

3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Dados de dinâmica de herbicida na palha

O banco de dados para modelagem da transposição de herbicida na palha de cana-de-açúcar foi conduzido através de um levantamento bibliográfico, visando coletar informações relevantes para a construção do modelo. Para compor o banco de dados necessário para a modelagem, foram combinadas informações de diversos autores renomados na área. Os autores cujas pesquisas foram utilizadas para a construção do banco de dados incluem Costa (2001), Rossi (2004), Corrêa (2005), Cavenagui et al. (2007), Tofoli (2009), Rossi et al. (2013), Araldi (2014), Araldi et al. (2015), Carbonari et al. (2016) e Santos (2019).

A fim de padronizar a saída do modelo, foi estabelecido o percentual de herbicida que transpôs a camada de palha de cana-de-açúcar como o resultado de interesse. A tabela 1 apresenta os herbicidas utilizados na modelagem, juntamente com suas características físico-químicas relevantes para o estudo.

Tabela 1 – Características físico-química dos herbicidas utilizado no modelo de palha.

Herbicida	MM g mol ⁻¹	S mg L ⁻¹	pka -	Kow -	PV mmHg	koc mL g ⁻¹
Ametryn	227,1	200	10,1	427,0	2,7x10 ⁻⁰⁶	316
Amicarbazone	241,3	4600	0,0	17,0	9,8x10 ⁻⁰⁹	30
Atrazine	215,7	35	1,7	501,0	2,9x10 ⁻⁰⁷	100
Clomazone	239,7	1212	0,0	380,0	2,0x10 ⁻⁰⁴	300
Diuron	233,1	35,6	0,0	741,0	8,6x10 ⁻⁰⁹	680
Fomesafen	460,7	50	2,7	794,0	1,0x10 ⁻⁰⁷	60
Glyphosate	169,7	15700	2,3	0,0017	1,8x10 ⁻¹⁰	20000
Haloxypop-p-methyl	375,7	7,9	4,3	11700	6,5x10 ⁻⁰⁷	75
Hexazinone	252,3	33000	2,2	14,8	2,0x10 ⁻⁰⁷	54
Indaziflam	301,4	2,8	3,5	631	1,9x10 ⁻¹⁰	1000
Metribuzin	214,3	10700	1,3	56,2	9,1x10 ⁻⁰⁷	37,92
S-metolachlor	283,8	480	0,0	1122,0	2,8x10 ⁻⁰⁵	200
Sulfentrazone	387,2	780	6,6	9,8	9,8x10 ⁻¹⁰	43
Tebuthiuron	228,3	2500	0,0	61,7	2,0x10 ⁻⁰⁶	80
Trifloxysulfuron-sodium	459,3	25700	4,8	0,380	7,5x10 ⁻⁰⁹	306

MM= Massa molar; S=solubilidade em água (mg L⁻¹); pka= constante de dissociação; kow=coeficiente de partição octanol-água; PV=pressão de vapor (mmHg); koc=coeficiente de sorção.

O modelo de RNA para estimar a transposição de herbicidas na palha utilizou diversas variáveis como entradas de dados. Essas variáveis incluíram a massa molecular, a solubilidade em água (mg L^{-1}), o pKa, o kow, a pressão de vapor (mmHg), o koc, a tonelada de palha por hectare, a simulação de chuva (mm) e a dose do herbicida em kg ha^{-1} (Tabela 2).

Para garantir a eficiência e a precisão do modelo, é essencial considerar o valor máximo e mínimo de cada uma dessas variáveis. Valores extremos fora do intervalo adequado podem levar a previsões inválidas ou pouco confiáveis. Portanto, é fundamental que os dados de entrada estejam corretamente normalizados e padronizados para garantir que o modelo seja capaz de generalizar para diferentes cenários.

Ao utilizar o modelo de RNA para estimar a transposição de herbicidas na palha, é importante garantir que as variáveis de entrada estejam dentro do intervalo adequado e que sejam selecionadas as características mais relevantes para o problema em questão.

Tabela 2 – Valor máximo e mínimo das entradas utilizada no modelo de palha.

Valor	MM	S	pka	kow	PV
	g mol^{-1}	mg L^{-1}	-	-	mmHg
Máximo	460,7	33000	10,1	11700	$2,03 \times 10^{-4}$
Mínimo	169,7	2,8	0	0,0017	$1,84 \times 10^{-10}$

Valor	koc	Palha	Chuva	Dose	Herbicida
	mL g^{-1}	ton ha^{-1}	mm	g i.a ha^{-1}	%
Máximo	20000	20	100	2800	96,0
Mínimo	30	5	1	37	0,7

MM= Massa molar; S=solubilidade em água (mg L^{-1}); pka= constante de dissociação; kow=coeficiente de partição octanol-água; PV=pressão de vapor (mmHg); koc=coeficiente de sorção; Palha= quantidade de palha de cana-de-açúcar Chuva=precipitação de mm; Dose= dose do herbicida; Herbicida= % de transposição do herbicida na palha.

3.2 Dados de dinâmica de herbicida no solo

Os dados para o modelo de disponibilidade de herbicida no solo foram coletados ao longo de diversos anos de estudos realizados por Ana Karollyna Alves de Matos, Ivana Ferraz, José Roberto Marques Silva, José Guilherme Cordeiro, Luís Marcelo Siono, Caio Antonio Carbonari e Edivaldo Domingues Velini no Núcleo de Pesquisas Avançadas em Matologia, pertencente ao Departamento de Proteção Vegetal da FCA/UNESP, no campus de Botucatu.

Para o estudo foram utilizados 124 tipos distintos de solo, cada um com características físico-químicas variadas, com o objetivo de investigar a disponibilidade de 15 herbicidas na solução do solo. Os herbicidas analisados são: clomazone, diuron, hexazinone, imazamox, imazapic, imazapyr, imazaquin, imazethapyr, indaziflam, isoxaflutole, metribuzin, pendimethalin, saflufenacil, sulfentrazone e sulfometuron-methyl, conforme listados na Tabela 3.

Tabela 3 – Características físico-química dos herbicidas utilizado no modelo.

Herbicida	MM	PV	S	pka	kow	T1/2	koc
	g mol ⁻¹	mmHg	mg L ⁻¹			dias	mL g ⁻¹
Clomazone	239,7	2,0x10 ⁻⁴	1212,0	0,0	380,0	23	300,0
Diuron	233,1	8,6x10 ⁻⁹	35,6	0,0	741,0	90	680,0
Hexazinone	252,3	2,0x10 ⁻⁷	33000,0	2,2	14,8	105	54,0
Imazamox	305,3	1,0x10 ⁻⁷	4413,0	2,3	5,4	200	11,6
Imazapic	275,3	7,5x10 ⁻⁸	2200,0	3,9	0,0	300	137,0
Imazapyr	261,3	9,8x10 ⁻⁸	11272,0	3,0	1,3	100	125,0
Imazaquin	311,3	5,3x10 ⁻¹⁵	60,0	3,8	2,2	60	20,0
Imazethapyr	289,3	1,0x10 ⁻⁷	1400,0	3,0	31,0	90	52,0
Indaziflam	301,4	1,9x10 ⁻¹⁰	2,8	3,5	631,0	150	1000,0
Isoxaflutole	359,3	2,4x10 ⁻¹⁰	6,8	0,0	209,0	28	112,0
Metribuzin	214,3	9,1x10 ⁻⁷	1100,0	1,3	56,2	40	37,9
Pendimethalin	281,3	2,5x10 ⁻⁵	0,3	0,0	152000,0	44	17200,0
Saflufenacil	500,9	3,4x10 ⁻¹⁷	2100,0	4,4	398,0	20	50,0
Sulfentrazone	387,2	9,8x10 ⁻¹⁰	110,0	6,6	9,8	180	43,0
Sulfometuron-methyl	364,4	5,5x10 ⁻¹⁶	244,0	5,2	0,3	24	85,0

MM= Massa molar, PV=pressão de vapor, S=solubilidade em água; pka= constante de dissociação; kow=coeficiente de partição octanol-água; T=meia vida; koc=coeficiente de sorção normalizado para MO.

As entradas utilizadas para o modelo foram as características físico-química dos herbicidas massa molar, pressão de vapor, solubilidade em água, constante de dissociação (pka), coeficiente de partição octanol-água (kow), meia vida, coeficiente de sorção normalizado para MO (koc), e do solo área, argila, silte, pH, matéria orgânica, soma de bases (SB), capacidade de troca de cátions (CTC) e percentual da CTC com SB (V%) (Tabela 4).

No contexto do modelo de solo, é de extrema importância considerar o valor máximo e mínimo de cada variável utilizada como entrada. Valores extremos fora do intervalo adequado podem prejudicar a eficiência e precisão do modelo, resultando em previsões inválidas ou pouco confiáveis. Portanto, é fundamental que os dados de entrada sejam corretamente normalizados e padronizados, garantindo assim que o modelo seja capaz de generalizar para diferentes cenários e oferecer resultados confiáveis.

Tabela 4 – Valor máximo e mínimo das entradas utilizada no modelo de solo.

Valor	Areia	Argila	Silte	pH	M.O.	SB	CTC	V
		g kg ⁻¹		CaCl ₂	dag dm ⁻³	mmol _c dm ⁻³		%
Máximo	971	730	545	7	69	210	222	95
Mínimo	105	22	3	4	0	2	22	5

Valor	MM	PV	S	pka	kow	T1/2	koc	Herbicida
	g mol ⁻¹	mmHg	mg L ⁻¹	-	-	Dias	mL g ⁻¹	%
Máximo	501	2,0x10 ⁻⁰⁴	33000	6,56	152000	300	17200	100
Mínimo	214	3,4x10 ⁻¹⁷	0,275	0	0,01	20	12	0

MO=matéria orgânica, SB=soma de bases, CTC=capacidade de troca de cátions, V=% da CTC com SB (V%), MM= Massa molar, PV=pressão de vapor, S=solubilidade em água, pka= constante de dissociação, kow=coeficiente de partição octanol-água, T=meia vida, koc=coeficiente de sorção normalizado para MO. Herbicida= % de disponibilidade no herbicida no solo.

Para determinar o percentual de herbicida na solução do solo foram realizadas 3 repetições por tipo de solo. As amostras de solos utilizadas foram fornecidas pelo laboratório de análises de solos do Departamento de Recursos Naturais/Área de Ciência do Solo da FCA/UNESP – Botucatu.

Foram pesados 7 g de cada amostra de solo, e acondicionadas em cartuchos plásticos com volume total de 10 mL, constituídos por uma pastilha porosa para retenção de partículas de solo e acoplados a um compartimento para a coleta da solução. Foi adicionado 1 ml de uma solução contendo 200 ppb do padrão analítico dos herbicidas em cada um dos cartuchos, que permaneceram em repouso durante 2 horas. Logo após, os cartuchos serão saturados com água deionizada com quantidade entre 0,8 a 2,0 ml por cartucho (Figura 4). Depois de saturados os cartuchos contendo o solo permaneceram em repouso durante 24 horas a 20°C.

Figura 4 – Cartuchos contendo solo saturado com solução dos herbicidas e água.



A extração da solução do solo foi realizada por meio de centrifugação dos cartuchos a 3270 G, a uma temperatura de 20°C por 5 minutos, utilizando a centrífuga Hettich Zentrifugen. A solução resultante foi filtrada por meio de uma membrana de PVDF 0,45 µm e 13,0 mm de diâmetro, e acondicionada em "vials" de 2,0 mL, sendo armazenada em freezer para posterior quantificação dos herbicidas. A quantificação foi realizada utilizando um sistema LC-MS/MS, que consiste em um Cromatógrafo Líquido de Alta Eficiência da marca Shimadzu, modelo Proeminence UFLC, equipado com duas bombas LC-20AD, auto-injetor SIL-20AC, degazeificador DGU-20A5, sistema controlador CBM-20A e forno CTO-20AC para controle da temperatura da coluna. O HPLC foi acoplado ao espectrômetro de massas 3200 Q TRAP, um híbrido triplo quadrupolo, onde Q1 e Q3 são utilizados como filtros de massa e Q2 é uma célula de colisão, responsável por quebrar as moléculas intactas e fragmentos de Q1 em fragmentos de massas menores (Figura 5).

Figura 5 – Cromatógrafo líquido (Proeminence UFLC) acoplado ao espectrômetro de massas (Triple Quad 3200) – LC-MS/MS.



3.3 Arquitetura da RNA para solo e palha

Neste estudo, foi utilizado uma RNA perceptron multicamadas com o algoritmo de retropropagação do erro para estimar o percentual de transposição do herbicida na palha quanto na solução do solo, com base nas informações das características físico-químicas.

A definição das funções de ativação é outro ponto relevante na configuração topológica da rede. Essas funções introduzem não-linearidades nas saídas dos neurônios, permitindo que a rede aprenda mapeamentos complexos. Diferentes funções de ativação, como a sigmoide, tangente hiperbólica, ReLU (Rectified Linear Unit) e suas variantes, foram utilizadas com base nas necessidades e características do problema em questão selecionando as que mais se adequou ao problema.

Durante o treinamento, os dados de treinamento foram inseridos na rede neural, gerando previsões de saída. Em seguida, calculou-se o erro entre as previsões obtidas e os dados de validação, e os pesos sinápticos foram atualizados utilizando a derivada parcial do erro em relação aos pesos. Esse processo foi repetido em várias épocas (iterações) até atingir um Erro Médio Quadrático (EMQ) mínimo, indicando a convergência do treinamento e fornecendo pesos atualizados para a rede neural.

O treinamento foi realizado variando o número de camadas, o número de neurônios em cada camada e o número de épocas. Como os valores iniciais são inicializados com valores aleatórios, cada treinamento resultou em valores diferentes. Para garantir a robustez do modelo, a rede foi treinada dez vezes com a mesma arquitetura, selecionando o melhor resultado.

Para o modelo RNA de transposição de palha, um banco de dados com 1872 entradas foi preparado. Em seguida, os dados foram divididos aleatoriamente em dois conjuntos: 70% (1310) dos dados foram utilizados para o treinamento do modelo, enquanto os 30% restantes (562) foram reservados para a validação do modelo. Essa divisão permitiu uma avaliação precisa e confiável do desempenho da rede neural em prever a transposição do herbicida na palha.

Para o modelo RNA solo, a amostra total utilizada consistiu de 124 tipos de solo e 15 herbicidas, totalizando 1860 observações. Também dividimos os dados em conjunto de treinamento, com 1302 amostras, e conjunto de validação, com 558 amostras.

A elaboração da RNA foi conduzida por meio do software R, fazendo uso do pacote H2O (LEDELL, et al., 2019). Utilizando esse pacote, foi possível calcular o percentual de importância dos parâmetros de entrada do modelo. Esse processo permitiu identificar quais variáveis têm maior impacto no desempenho e resultado da RNA. Com essa análise de importância, podemos aperfeiçoar a arquitetura da RNA e otimizar sua capacidade de aprendizado e generalização, tornando-a mais eficaz em suas aplicações futuras.

Para garantir que cada parâmetro de entrada recebesse igual atenção durante o treinamento, ampliando assim sua eficiência, tanto os dados de entrada quanto os de saída foram padronizados para o intervalo \ln (logaritmo natural) pela seguinte equação:

$$\ln = (x) + 1 \quad (6)$$

em que: “ \ln ” é o logaritmo natural; “ x ” é o valor de observado;

Para transformar os valores padronizados em valores de saída da RNA foi utilizada a seguinte equação.

$$yi = e^{(x-1)} \quad (7)$$

em que: “ yi ” valor de saída corrigido; “ x ” valor de saída da RNA.

3.4 Avaliação dos modelos

O parâmetro utilizado para avaliar o desempenho do modelo de RNA foi o Erro Quadrático Médio Amostral (EQM), a Raiz do Erro Quadrático Médio (REQM) e o Percentual da Raiz do Erro Quadrático Médio, pois quanto menor for esse erro no conjunto de validação, melhor será a arquitetura da RNA associada a ele. Essas métricas são fundamentais para medir a precisão do modelo e sua capacidade de fazer previsões acuradas em relação aos dados não vistos durante o treinamento. Quanto menor o EQM e a REQM, e menor o percentual associado à REQM, mais confiável será o modelo em sua capacidade de generalização e predição em diferentes cenários, contribuindo para resultados mais confiáveis na estimativa do percentual de transposição do herbicida na solução do solo.

$$EQM = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - x_i)^2}{n} \quad (8)$$

$$REQM = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{(y_i - x_i)^2}{n}} \quad (9)$$

$$REQM\% = \frac{100}{y} \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{(y_i - x_i)^2}{n}} \quad (10)$$

em que: “n” representa o número de amostras do conjunto, “y_i” é o valor de referência (dados de validação), “x_i” é o valor estimado pelo modelo para a iésima amostra, “y” é a média dos valores de referência.

Para avaliar a relação entre os dados estimados pela RNA e os dados de validação do método de referência, calculou-se o coeficiente de correlação de Pearson (r) entre os valores estimados e os valores experimentais.

O coeficiente de correlação de Pearson mede a intensidade e a direção da relação linear entre os dois conjuntos de dados. Ele varia de -1 a +1, onde +1 representa uma correlação positiva perfeita, -1 representa uma correlação negativa perfeita e 0 indica ausência de correlação linear.

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sqrt{[\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2][\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2]}} \quad (11)$$

sendo: r = coeficiente de correlação de Pearson; x_i – valores estimados pelo modelo; \bar{x} - média dos valores estimados y_i - valores de referência (dados de validação), \bar{y} - média dos valores observados.

Após calcular os valores de correlação de Pearson para cada conjunto de dados, realizou-se a classificação de cada valor com base na seguinte interpretação (conforme Tabela 5).

Tabela 5 – Interpretação do coeficiente de correlação.

Valor de r (+ ou -)	Interpretação
0,0 a 0,19	Correlação bem fraca
0,20 a 0,39	Correlação fraca
0,40 a 0,69	Correlação moderada
0,70 a 0,89	Correlação forte
0,90 a 1,00	Correlação muito forte

Na avaliação dos resultados obtidos com as RNAs desenvolvidas, foram utilizados dois índices de desempenho adicionais: o coeficiente de determinação (r^2) e o índice de confiança (c), proposto por Camargo e Sentelhas (1997).

O coeficiente de determinação (r^2) é uma medida comum de ajuste do modelo e indica a proporção da variância dos dados que é explicada pelo modelo. Valores de r^2 mais próximos de 1 indicam que o modelo se ajustou bem aos dados.

O índice de confiança (c) é calculado pelo produto do coeficiente de correlação (r) e do índice de concordância (d), proposto por Willmott et al. (1985). O índice de concordância avalia o afastamento dos valores estimados em relação aos observados, variando de 0 (nenhuma concordância) a 1 (concordância perfeita). O coeficiente de correlação (r) mede a relação linear entre os valores estimados e observados.

Esses índices de desempenho, juntamente com o índice de concordância (d), proporcionam uma análise abrangente e precisa dos resultados obtidos com as RNAs desenvolvidas, permitindo uma avaliação mais completa e criteriosa do modelo de estimativa do percentual de transposição do herbicida na solução do solo.

$$d = 1 - \left[\frac{\sum (xi - yi)^2}{\sum (|xi - 0| + |yi - 0|)^2} \right] \quad (12)$$

sendo: xi = valor estimado pelo modelo; yi = valores de referência; y = média dos valores referência.

Ao utilizar o índice de confiança (c), podemos ter uma medida mais completa e robusta do desempenho do modelo, considerando tanto a relação linear quanto a concordância dos valores estimados em relação aos observados. Valores de c mais próximos de 1 indicam uma maior confiança nas estimativas do modelo.

$$c = r * d \quad (13)$$

A Tabela 6 apresenta os valores desses índices para cada modelo testado, facilitando a comparação e interpretação dos resultados.

Tabela 6 - Critério de interpretação do desempenho dos métodos de estimativa da RNA pelo índice “c”.

Valor de c	Desempenho
>0,85	Ótimo
0,76 a 0,85	Muito Bom
0,66 a 0,75	Bom
0,61 a 0,65	Mediano
0,51 a 0,60	Sofrível
0,41 a 0,50	Mau
≤ 0,40	Péssimo

Com todos dados de entrada para os modelos de solo e palha foi realizado a matriz de correlação de Pearson com o auxílio do software R. Os gráficos de correlação entre os valores obtidos na RNA e dados de validação foram plotados no software Excel.

Para os gráficos de percentual de importância, plotado no software SigmaPlot, foi calculado o erro de cada valor de entrada pela fórmula:

$$erro = \frac{desv}{\sqrt{n}} \quad (14)$$

onde: *desv* é o desvio padrão da amostra e *n* é o número de repetições.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Modelagem da dinâmica em palha

Em todas as arquiteturas de redes neurais avaliadas neste estudo, o índice de desempenho (c) apresentou valores acima de 0,95, classificando as RNA's como tendo um desempenho ótimo. Além disso, todas as RNA's mostraram correlação de Pearson positiva com os dados de validação, indicando uma correlação forte (Tabela 7).

A arquitetura da rede neural com 1 camada oculta composta por 9 neurônios se destacou, apresentando tanto uma correlação forte quanto um índice de desempenho ótimo. Isso significa que essa configuração da RNA foi capaz de fazer previsões com alta precisão, mantendo um baixo nível de REQM (percentual da raiz do erro quadrático médio) de apenas 8,9% para a transposição do herbicida na palha.

A escolha de redes neurais com menor número de camadas e neurônios oferece algumas vantagens práticas. Primeiramente, isso simplifica a capacidade computacional da RNA, tornando o processo de treinamento e aplicação mais eficiente. Além disso, a utilização de uma arquitetura mais enxuta facilita a transferência do modelo para outras plataformas, como softwares e aplicativos, permitindo sua aplicação em diferentes contextos e ambientes.

Os resultados indicam que as redes neurais testadas foram bem-sucedidas em prever a transposição do herbicida na palha, e a escolha da arquitetura com uma única camada oculta e 9 neurônios se mostrou particularmente eficiente. Essas descobertas podem ter implicações importantes na aplicação prática da tecnologia de redes neurais para estimar a transposição de herbicidas em sistemas agrícolas, proporcionando uma ferramenta precisa e confiável no posicionamento de herbicidas em culturas como a cana-de-açúcar.

Tabela 7 - Número de camadas da rede neural artificial (RNA) e parâmetros de avaliação de desempenho.

Número de camadas da rede neural					Função de ativação	REQM%	REQM	r	r ²	c
1	2	3	4	5						
9					Tangente	8,9	5,3	0,973	0,946	0,959
9	18				Tangente	6,5	3,9	0,984	0,969	0,976
9	18	36			Tangente	5,9	3,5	0,987	0,974	0,98
9	18	36	72		Tangente	7,5	4,5	0,982	0,964	0,972
9	18	36	72	144	Tangente	6,8	4,1	0,983	0,966	0,974
18					Tangente	7,5	4,5	0,982	0,965	0,972
36					Tangente	6,2	3,7	0,985	0,971	0,978
72					Tangente	6,5	3,9	0,985	0,97	0,977
144					Tangente	7,2	4,3	0,982	0,965	0,973

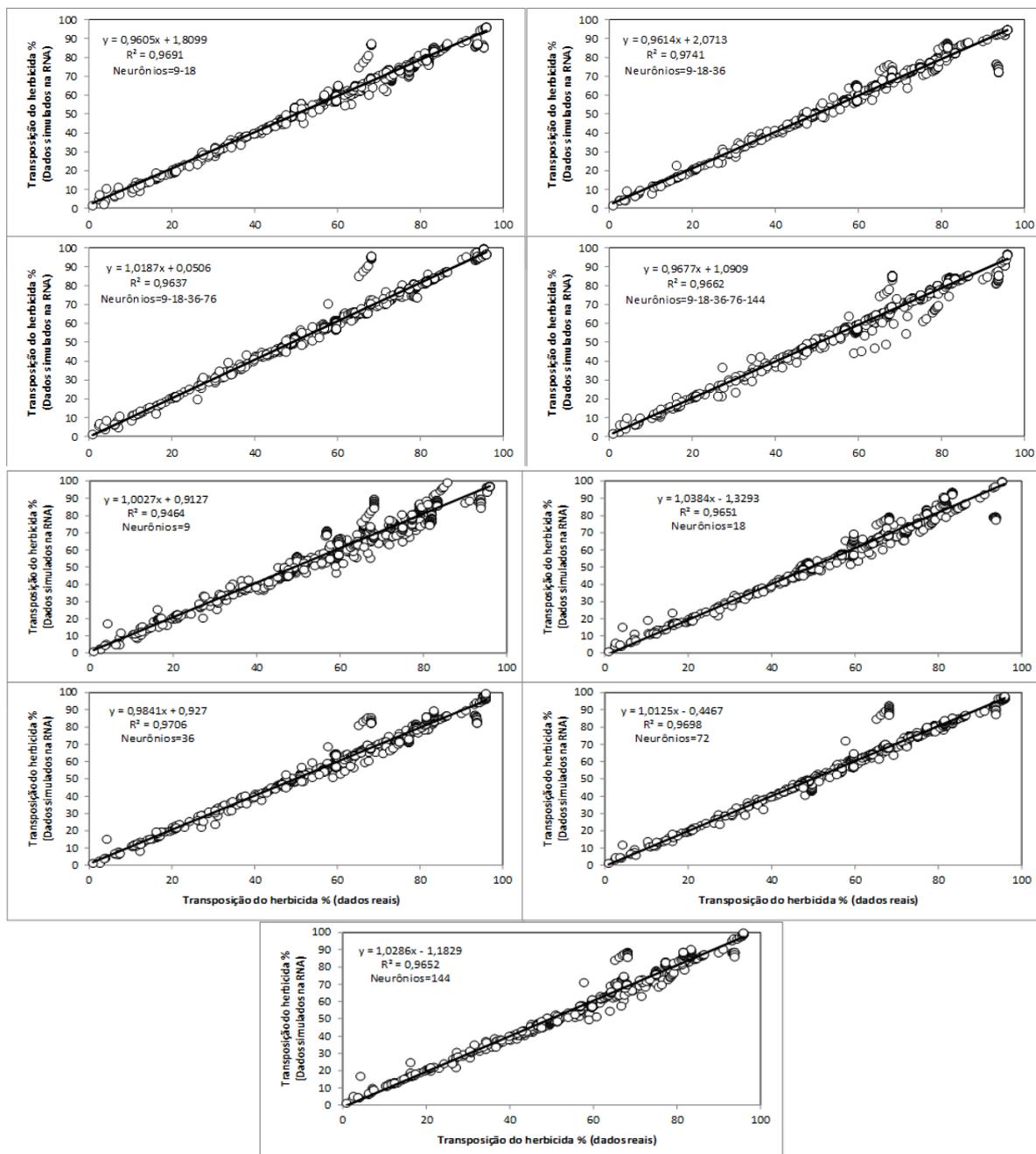
A seleção da arquitetura adequada para uma rede neural é uma etapa crucial no desenvolvimento de modelos precisos e confiáveis. Conforme mencionado por Braga et al. (2007), a escolha da arquitetura deve ser cuidadosa, pois uma rede com várias camadas escondidas ou com muitos neurônios nessas camadas pode apresentar excelentes resultados nos dados de treinamento, mas pode não generalizar bem para os dados de validação, levando a resultados incertos.

Em estudos conduzidos por Soares et al. (2014), foram encontrados erros na seleção da arquitetura da rede neural, destacando a importância de escolher a configuração que apresente o menor erro quadrático médio e o menor número de neurônios na camada escondida. Isso demonstra que a seleção adequada da arquitetura é fundamental para garantir a eficácia e a precisão dos resultados obtidos com a rede neural.

Nos resultados deste estudo, as redes neurais, independentemente da arquitetura utilizada, apresentaram estimativas com correlação muito forte ($R > 0,90$) em relação aos dados de validação (Figura 6). Quanto mais próximos os pontos de dados estiverem da linha de tendência, melhor será o desempenho da rede neural. O coeficiente de correlação (R^2) é uma medida importante para dimensionar o grau de associação entre as duas variáveis analisadas no estudo, e seu valor absoluto varia de 0 a 1. Quanto maior o valor absoluto do coeficiente de correlação, maior é o grau de aproximação entre os valores estimados pela rede neural e os dados de validação observados.

Esses resultados confirmam que a rede neural utilizada neste estudo demonstrou uma alta capacidade de estimar os valores de transposição do herbicida na palha de forma precisa e acurada, independentemente da arquitetura utilizada. A forte correlação entre os dados estimados pela RNA e os dados de validação sugere que a rede neural é uma ferramenta poderosa para prever a transposição de herbicidas em sistemas agrícolas com palhada.

Figura 6 – Correlação da transposição de herbicidas na palha com os dados de validação simulados com diferentes arquiteturas de rede utilizadas pela rede neural artificial.

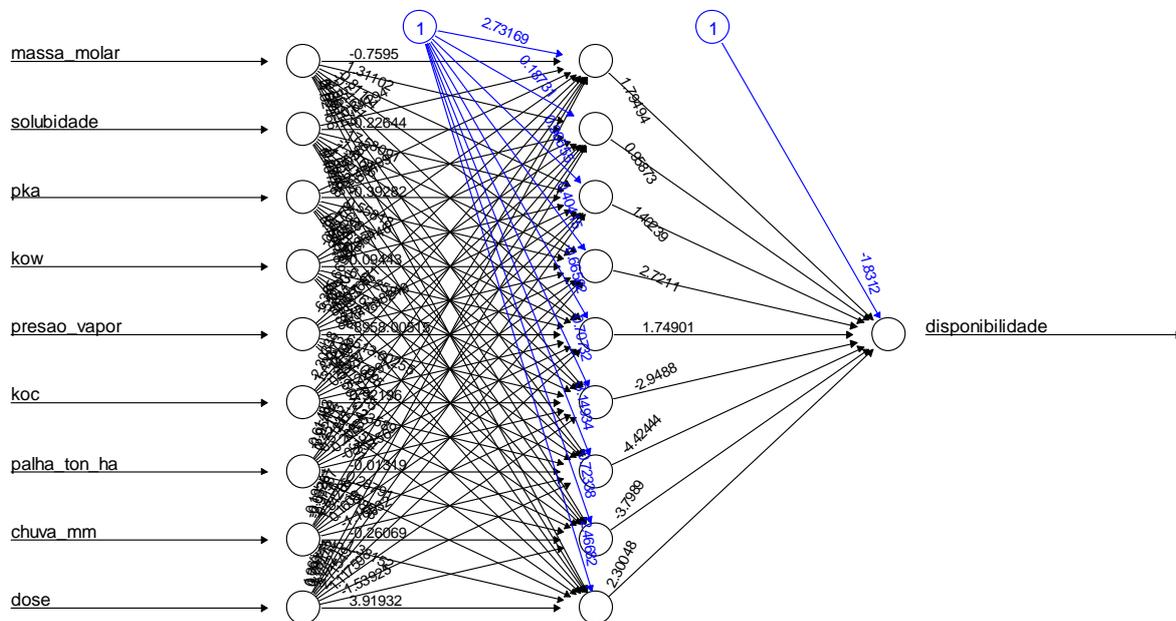


O pacote H2O proporciona a criação de um gráfico representando a Rede Neural Artificial (RNA) com todos os pesos sinápticos e bias utilizados. A Figura 7 mostra essa representação gráfica, destacando as entradas utilizadas no modelo massa molar (g mol^{-1}), solubilidade em água (mg L^{-1}), pka, kow, pressão de vapor (mmHg), kow, tonelada de palha por hectare (ton ha^{-1}), lâmina de chuva (mm), dose do herbicida (g i.a ha^{-1}) e a saída, que corresponde a transposição de herbicida na palha.

A montagem gráfica da RNA com os pesos sinápticos e bias é uma ferramenta útil para visualizar a estrutura e o funcionamento da rede, permitindo uma melhor compreensão dos relacionamentos entre as variáveis de entrada e a saída do modelo.

Essa representação gráfica contribui para uma análise mais detalhada do modelo, possibilitando a identificação de possíveis padrões e interações complexas entre as variáveis envolvidas na estimativa da transposição de herbicidas na palha. Isso pode auxiliar na interpretação dos resultados e no ajuste do modelo para obter previsões mais precisas e confiáveis.

Figura 7 – Modelo da rede neural artificial para a dinâmica de palha.



Error: 2.35955 Steps: 126171

A análise do percentual de importância no modelo revelou que os parâmetros de entrada "dose do herbicida" e "Pressão de vapor" desempenharam um papel crucial na estimativa do percentual de transposição do herbicida na palha. Essas duas variáveis foram as mais significativas, totalizando 29,5% de importância no modelo (Figura 8).

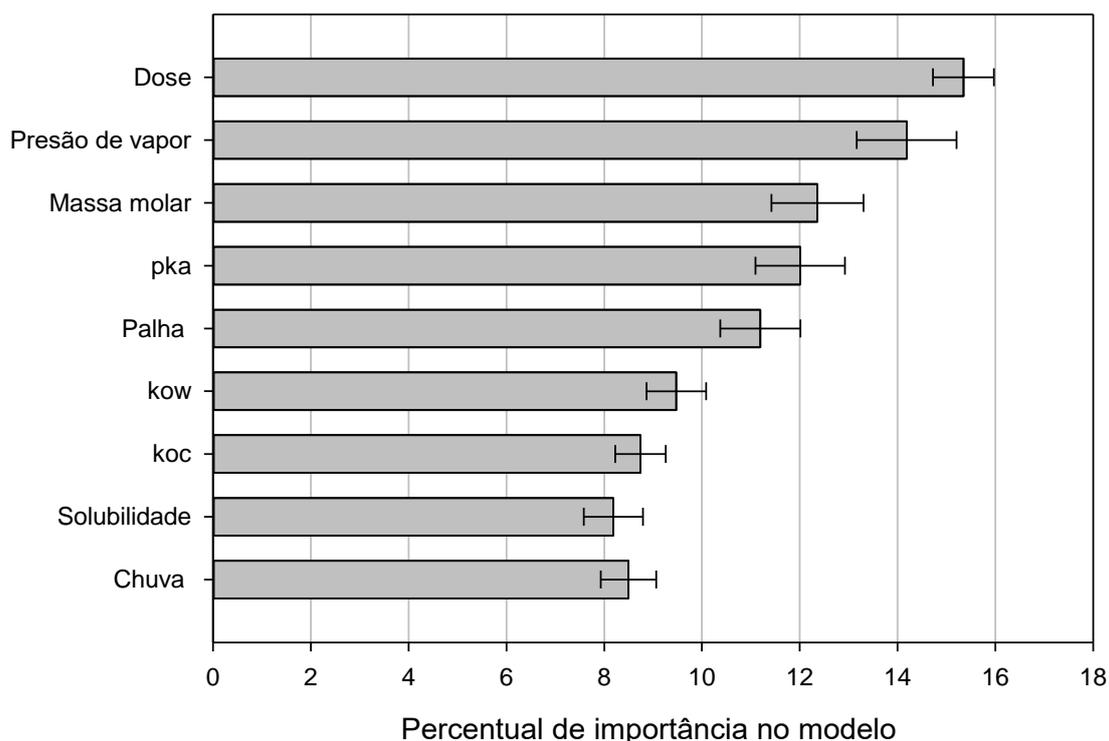
A importância da "dose do herbicida" pode ser explicada pelo seu impacto direto na quantidade aplicada, o que afeta diretamente a concentração do herbicida na palha. Doses inadequadas podem levar a uma baixa transposição, afetando a eficácia do controle de plantas daninhas, conforme evidenciado em estudos anteriores (Carbonari et al., 2010).

Por outro lado, a "pressão de vapor" também desempenha um papel significativo. Herbicidas com alta pressão de vapor podem volatilizar facilmente, reduzindo sua capacidade de serem transpostos pela camada de palha e, portanto, atingirem o solo. Isso pode resultar em um controle menos efetivo de plantas daninhas, conforme constatado em pesquisas anteriores com os herbicidas clomazone e hexazinona em palha de cana-de-açúcar (Carbonari et al., 2010).

Nesse estudo, a observação de uma diminuição no controle de *Brachiaria decumbens* e *Ipomoea hederifolia* quando os herbicidas permaneceram sobre a palha por 60 dias antes da ocorrência de chuva, reforça a importância da "pressão de vapor" como um fator crítico que influencia a transposição do herbicida na presença de palhada. Os resultados também são congruentes com a alta volatilidade do clomazone, que pode reduzir sua capacidade de atingir o solo em sistemas com presença de palhada (Rodrigues, 1993).

O resultado da análise de importância no modelo de dinâmica do herbicida na palha destacou a "Dose do herbicida" como um fator determinante para as previsões. Essa variável pode estar diretamente relacionada à composição da formulação dos herbicidas utilizados no estudo (Figura 8).

Figura 8 – Percentual de importância no modelo dos variável de entrada característica físico-químicas herbicida. Dose=dose do herbicida (g i.a ha^{-1}); Pressão de vapor em (mmHg); pka= constante de dissociação; Palha= quantidade de palha de cana-de-açúcar (ton ha^{-1}); kow=coeficiente de partição octanol-água; koc=coeficiente de sorção; Solubilidade em água (mg L^{-1}); Chuva=precipitação de mm.



É importante destacar que os herbicidas podem ser comercializados em diferentes formulações, mesmo tendo o mesmo princípio ativo, de acordo com o fabricante (Rodrigues; Almeida, 2018). A "dose do herbicida" utilizada no estudo pode estar associada a diferentes concentrações de ativos e adjuvantes na formulação do produto.

Em casos de aplicação de herbicidas em maiores doses, é comum que esses produtos contenham uma quantidade maior de adjuvantes em sua composição. Esses adjuvantes podem influenciar significativamente na dinâmica do herbicida, afetando sua persistência e interação com a palha.

Tomando como exemplo o herbicida diuron, utilizado na dose de $2800 \text{ g i.a ha}^{-1}$ nos dados levantados para o estudo, a concentração indicada na bula é de 80% de ingrediente ativo. Isso permite que a recomendação de aplicação seja de 3500 g

ha⁻¹ de produto comercial, possibilitando a adição de aproximadamente 700 g ha⁻¹ de inertes e adjuvantes (Araldi, 2014; Rodrigues; Almeida, 2018).

Apesar da "Precipitação" (chuva em mm) ter apresentado menor importância no modelo, com 8,5%, é essencial destacar que a presença de água é um fator crucial para a transposição de herbicidas na palha. Mesmo sendo uma variável com menor peso no modelo, sua contribuição é de extrema importância para o processo de transposição.

A dinâmica do tebuthiuron em palha de cana-de-açúcar, por exemplo, é diretamente afetada pela quantidade de chuva. Estudos realizados por Tofoli et al. (2009) mostraram que 65 mm de chuva simulada foram suficientes para transpor 50% da dose do herbicida aplicada. Isso indica que a presença de água é fundamental para o movimento do herbicida através da palha e sua eventual chegada ao solo.

Além disso, os mesmos autores observaram que a transposição do tebuthiuron em palha de cana-de-açúcar pode ser significativamente influenciada por uma quantidade menor de chuva. Com apenas 20 mm de chuva simulada, já é possível observar diferenças significativas na saída do produto em diferentes quantidades de palha.

Esses resultados ressaltam a importância da "Precipitação" na transposição de herbicidas na palha, mesmo que sua importância no modelo seja menor. A presença de água é um fator essencial para a mobilidade dos herbicidas nesse contexto, e o conhecimento de como a chuva afeta a dinâmica dos produtos fitossanitários é fundamental para um manejo adequado e sustentável em sistemas agrícolas com palhada.

4.2 Disponibilidade de herbicida no solo

O índice de desempenho (c) apresentou valores acima de 0,90 quando foram utilizadas de duas a cinco camadas ocultas, indicando um desempenho ótimo do modelo. Além disso, a correlação de Pearson positiva foi observada com os dados de validação, mostrando uma correlação forte, especialmente quando foi utilizado um maior número de neurônios na camada oculta (Tabela 8).

A arquitetura da rede neural que apresentou os melhores resultados consistiu em três camadas ocultas, com 15 neurônios na primeira camada, 30 neurônios na segunda camada e 60 neurônios na terceira camada. Essa configuração permitiu obter uma correlação forte entre os dados estimados pela RNA e os dados de validação, além de um índice de desempenho ótimo.

Como resultado dessa arquitetura, o modelo apresentou um menor REQM (percentual da raiz do erro quadrático médio) de 27, o que indica que a RNA foi capaz de prever a disponibilidade de herbicida no solo de forma mais precisa e acurada.

Esses resultados corroboram a capacidade da RNA em lidar com um maior grau de complexidade e variabilidade dos dados, possibilitando a obtenção de previsões mais confiáveis e generalizáveis. A arquitetura da rede com três camadas ocultas e um número maior de neurônios permitiu uma melhor adaptação do modelo aos padrões dos dados de entrada, resultando em estimativas mais precisas para a disponibilidade de herbicida no solo.

O estudo conduzido por NAGAOKA et al. (2005) ao trabalhar com Redes Neurais Artificiais (RNAs) para estimar a densidade do solo identificou uma limitação na capacidade de estabelecer uma ligação significativa entre os dados de entrada e de saída da rede, mesmo ao testar diferentes arquiteturas de RNAs. Além disso, os resultados demonstraram que não houve nenhuma forma de correlação além da característica inerente da modelagem.

Tabela 8 – Número de camadas da rede neural artificial (RNA) e parâmetros de avaliação de desempenho.

Número de camadas da RNA					Função de ativação	REQM%	REQM	R	r2	C
1	2	3	4	5						
15					Tangente	56,3	15,2	0,822	0,675	0,74
15	30				Tangente	36,2	9,7	0,921	0,848	0,883
15	30	60			Tangente	27	7,3	0,956	0,914	0,935
15	30	60	120		Tangente	27	7,3	0,956	0,915	0,934
15	30	60	120	240	Tangente	28,3	7,6	0,951	0,904	0,927
30					Tangente	48	12,9	0,864	0,746	0,798
60					Tangente	36,4	9,8	0,925	0,856	0,889
120					Tangente	38,5	10,4	0,921	0,848	0,881
240					Tangente	38,6	10,4	0,914	0,836	0,873

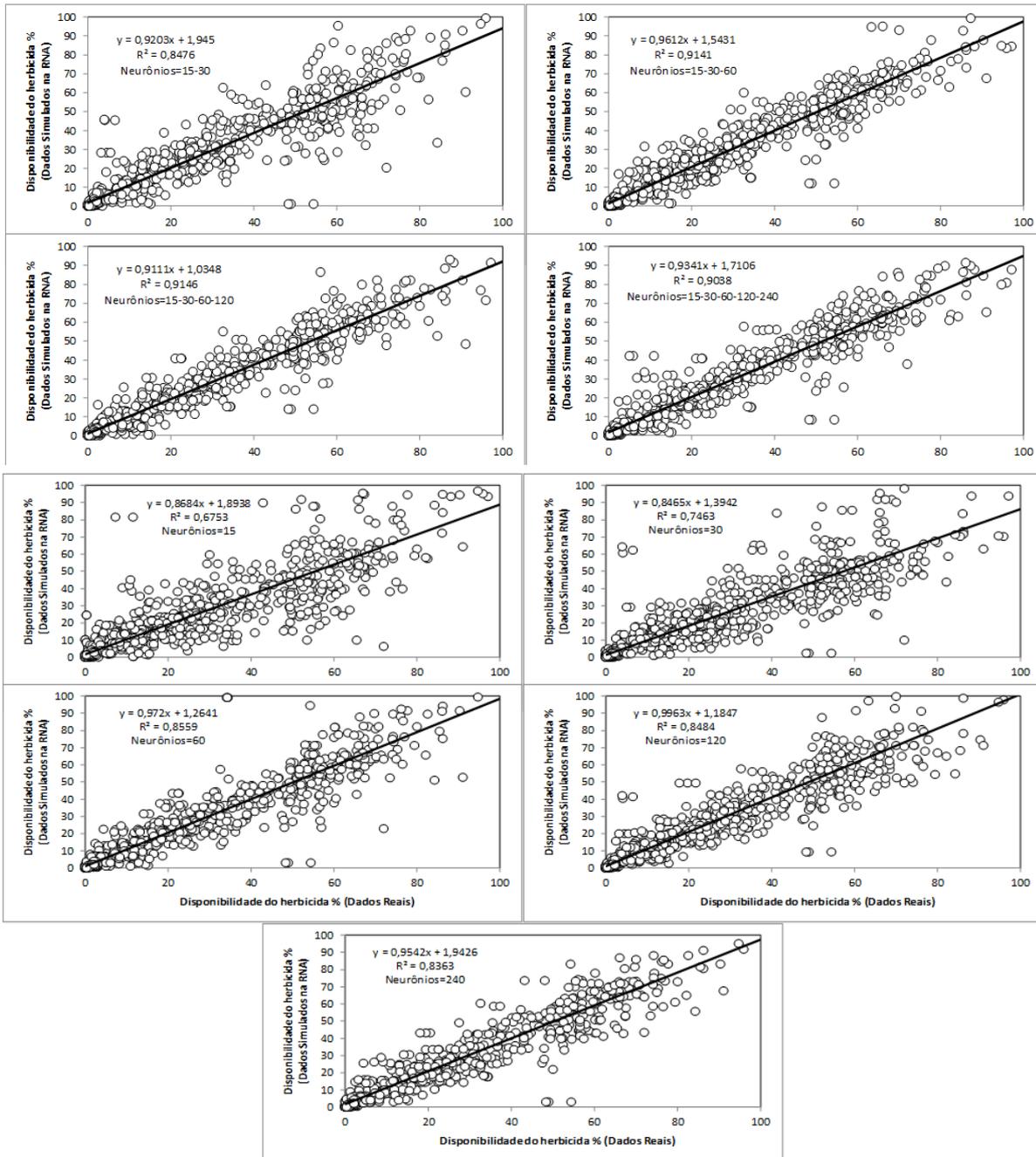
Os resultados obtidos para a RNA na estimativa da disponibilidade de herbicidas na solução do solo são apresentados na figura 9. A correlação muito forte ($>0,90$), independente da arquitetura utilizada é um indicativo claro da qualidade do modelo de RNA.

Uma correlação acima de 0,90 revela uma relação robusta entre as estimativas realizadas pela RNA e os dados de validação dos dados de disponibilidade do herbicida no solo. Essa forte correlação sugere que a RNA foi capaz de capturar com precisão e acurácia as relações complexas entre as variáveis de entrada e a variável de saída, que é a disponibilidade do herbicida no solo.

O fato de a RNA ter alcançado uma correlação tão alta indica que o modelo é capaz de generalizar bem para novos dados, ou seja, a rede neural não apenas memorizou o conjunto de treinamento, mas também aprendeu padrões e tendências significativas que podem ser aplicados a dados não vistos previamente.

Essa capacidade de generalização é de extrema importância, pois permite que o modelo seja aplicado em situações originais e faça previsões confiáveis para condições diferentes daquelas usadas no treinamento.

Figura 9 – Correlação da disponibilidade de herbicidas na solução do solo com os dados de validação simulados pela rede neural artificial.



A Figura 10, que mostra a complexidade da rede neural artificial (RNA) elaborada pelo pacote H2O para estimar a disponibilidade de herbicida na solução do solo, revela que o modelo possui um grande número de entradas (15) e neurônios na camada oculta (15-30-60).

A complexidade da rede neural é determinada pelo número de neurônios em cada camada oculta, bem como pelo número de camadas ocultas e pelo número de entradas no modelo. Nesse caso, a RNA foi configurada com três camadas ocultas, sendo a primeira com 15 neurônios, a segunda com 30 neurônios e a terceira com 60 neurônios.

Os resultados obtidos com o uso de redes neurais com múltiplas camadas ocultas e um grande número de neurônios são promissores e indicam que essa abordagem pode ser benéfica para a estimativa da disponibilidade de herbicidas no solo. A complexidade da RNA permite que ela aprenda e capture relações complexas e não lineares presentes nos dados de treinamento, o que é especialmente relevante para lidar com problemas que envolvem interações complexas entre diversas variáveis físico-químicas do solo.

A disponibilidade de herbicidas no solo é influenciada por uma série de fatores, como pH, matéria orgânica, argila, coeficiente de partição solo-água (K_{oc}), capacidade de troca catiônica (CTC) e outros atributos do solo. Essas variáveis podem interagir de maneiras complexas e não lineares, tornando a relação entre as características do solo e a disponibilidade do herbicida uma tarefa desafiadora para modelos tradicionais.

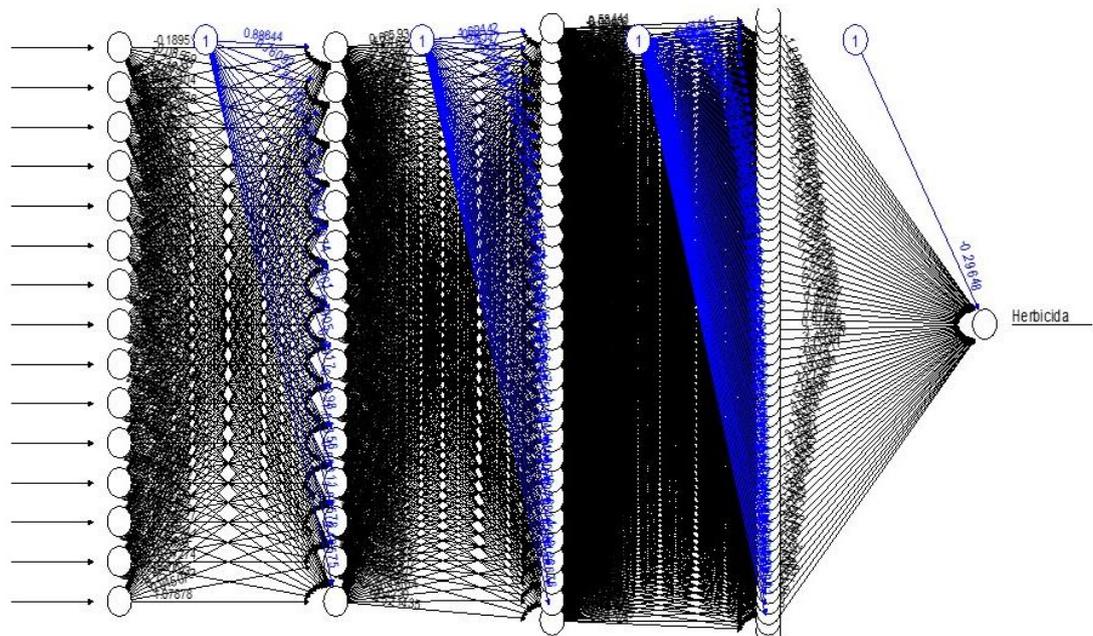
Ao empregar redes neurais com múltiplas camadas ocultas e um grande número de neurônios, a RNA tem a capacidade de aprender representações mais complexas e precisas dessas interações, permitindo uma modelagem mais detalhada e acurada. Isso é crucial para fornecer estimativas mais confiáveis e realistas da disponibilidade de herbicidas no solo.

Contudo, é importante ressaltar que o aumento da complexidade também traz consigo o risco de sobreajuste. Para evitar esse problema, a validação cruzada e o

uso de conjuntos de teste independentes são abordagens fundamentais para avaliar a capacidade de generalização do modelo.

Além disso, é importante considerar que o sucesso do modelo de RNA depende da qualidade dos dados de treinamento e da escolha adequada das variáveis de entrada. A seleção cuidadosa das características físico-químicas do solo a serem incluídas no modelo é fundamental para garantir que o mesmo seja relevante e útil na prática.

Figura 10 – Modelo da rede neural artificial para disponibilidade de herbicida na solução do solo.



A análise da importância das variáveis no modelo de RNA para a dinâmica de herbicidas no solo revelou que o pH e a matéria orgânica são os fatores mais relevantes, representando juntos 16,95% de importância (Figura 11). Em seguida, as variáveis argila (7,81%), Koc (7,27%) e CTC (7,15%) também demonstraram contribuições significativas para o modelo.

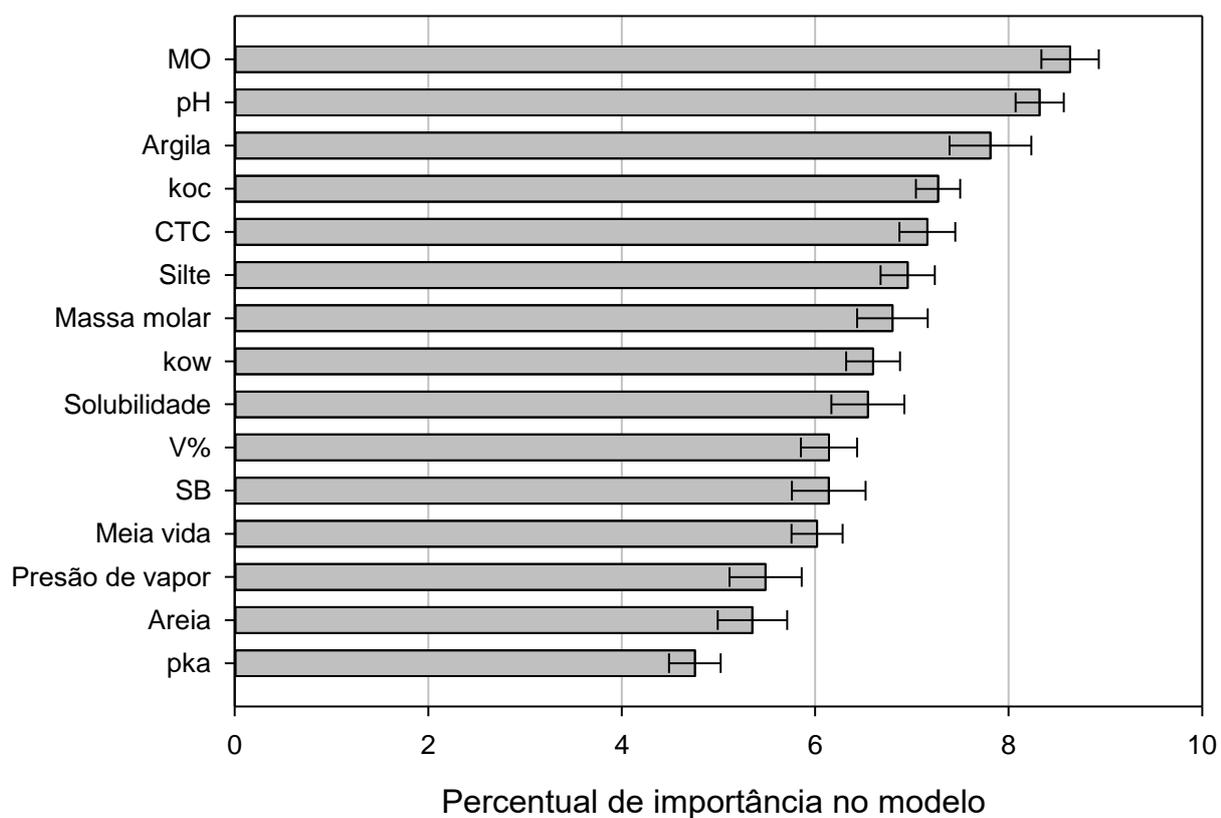
A presença de matéria orgânica no solo desempenha um papel fundamental na sorção de herbicidas, conforme destacado em estudos anteriores (Cara et al., 2017). Solos com alto teor de matéria orgânica geralmente apresentam uma maior capacidade de adsorver herbicidas, o que pode afetar diretamente sua disponibilidade e movimentação no solo.

Diversas pesquisas confirmaram a importância da matéria orgânica na adsorção de agrotóxicos, como mencionado por Giori et al. (2014), Bonfleur et al. (2015) e Gámiz et al. (2018). Esses estudos ressaltam que a presença de componentes orgânicos é crucial para a retenção e redução da mobilidade de herbicidas em solos contaminados.

Além disso, programas de descontaminação de água e solos contaminados com resíduos de herbicidas frequentemente utilizam materiais orgânicos, como carvão ativado e outros compostos de origem animal e vegetal (Rojas et al., 2015, Yavari et al., 2019). Esses materiais são empregados devido à sua capacidade de adsorção e retenção de substâncias químicas, contribuindo para a mitigação da contaminação e a preservação do ambiente.

Os resultados obtidos nesta pesquisa indicam que a matéria orgânica e o pH do solo desempenham um papel crucial na dinâmica de herbicidas. A compreensão da influência dessas variáveis é essencial para o desenvolvimento de estratégias de controle de plantas daninhas em diferentes cenários.

Figura 11 – Percentual de importância no modelo dos parâmetros de entrada característica físico-químicas do solo e herbicida. MO=matéria orgânica, SB=soma de bases, CTC=capacidade de troca de cátions, V%= % da CTC com SB, pka= constante de dissociação, kow=coeficiente de partição octanol-água, koc=coeficiente de sorção normalizado para MO.



5 CONCLUSÕES

Com base nos resultados apresentados, algumas conclusões importantes podem ser destacadas:

Todas as arquiteturas de redes neurais avaliadas neste estudo apresentaram um desempenho ótimo, com um índice de desempenho (c) acima de 0,95. Além disso, todas as redes neurais mostraram uma correlação positiva de Pearson com os dados de validação, indicando uma forte relação entre as previsões da RNA e os valores reais.

A arquitetura com 1 camada oculta composta por 9 neurônios se destacou, apresentando tanto uma correlação forte quanto um índice de desempenho ótimo. Isso significa que essa configuração da RNA foi capaz de fazer previsões com alta precisão, mantendo um baixo nível de REQM de apenas 8,9% para a transposição do herbicida na palha.

A análise da importância das variáveis no modelo de dinâmica do herbicida na palha revelou que a "dose do herbicida" e a "pressão de vapor" desempenharam papéis cruciais nas previsões. Essas variáveis afetam diretamente a concentração e a movimentação do herbicida na palha.

O modelo de RNA para a estimativa da disponibilidade de herbicidas no solo mostrou resultados promissores. A arquitetura com três camadas ocultas e um maior número de neurônios permitiu uma melhor adaptação do modelo aos padrões dos dados de entrada, resultando em estimativas mais precisas.

A análise da importância das variáveis no modelo de disponibilidade de herbicida no solo destacou o pH e a matéria orgânica como os fatores mais relevantes. A presença de matéria orgânica influencia significativamente a adsorção e a mobilidade de herbicidas no solo.

A forte correlação entre as estimativas da RNA e os dados de validação indica que o modelo é capaz de generalizar bem para novos dados, sendo capaz de fazer previsões confiáveis para diferentes condições não vistas previamente.

REFERÊNCIAS

- ABIODUN, O. I. et al. **State-of-the-art in artificial neural network applications: A survey**. *Heliyon*, v. 4, n. 11, 2018.
- ABREU, M. A. L. de. **Desempenho de técnicas de Aprendizado de Máquina em Reconhecimento de Voz**. 2019.
- AGAHIAN, S.; AKAN, T. Battle royale optimizer for training multi-layer perceptron. **Evolving Systems**, v. 13, n. 4, p. 563-575, 2022.
- AHMED, E. et al. Deep learning advances on different 3D data representations: A survey. **arXiv preprint arXiv:1808.01462**, v. 1, 2018.
- ANGELICO, J. C. **Desempenho das redes neurais artificiais na estimativa das variáveis físicas e químicas do solo**. 2005.
- ANTUNIASSI, U. R, Boller, W. **Tecnologia de Aplicação para Culturas Anuais**. 2 ed. Botuatu:Fepaf, p. 373. 2019.
- ARALDI, R. **Avaliação do controle de azevém (*Lolium multiflorum*) nas condições de cana crua em Louisiana/EUA e dinâmica dos herbicidas na palha**. Tese (Doutorado em Agronomia/Agricultura) – Faculdade de Ciências Agrônômicas, Universidade Estadual Paulista, Botucatu, 2014.
- ARALDI, R. et al. Dinâmica de herbicidas em palha de cana-de-açúcar. **Ciência Rural**, v. 45, n. 12, p. 2193-2198, dez. 2015.
- ARBIB, M. A. **Brains, machines, and mathematics**. Springer Science & Business Media, 2012.
- ARTUZI, J.P., CONTIERO, R.L. Herbicidas aplicados na soja e produtividade do milho em sucessão. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v.41, n.7, p.1119-1123, 2006.
- ASEFPOUR VAKILIAN, K., MASSAH, J. An artificial neural network approach to identify fungal diseases of cucumber (*Cucumis sativus* L.) plants using digital image processing. **Archives of Phytopathology and Plant Protection**, v. 46, n. 13, p. 1580-1588, 2013.
- AZEVEDO, L. A. S. Adjuvantes agrícolas para a proteção de plantas. **Seropédica: IMOS**, p. 264, 2011.
- BANKS, P.A., ROBINSON, E.L. The influence of straw mulch on the soil reception and persistence of metribuzin. **Weed Science**, v.30, n.2, p.164-168, 1982
- BARRETO, J. M. **Inteligência artificial no limiar do século XXI**. 3. ed. Florianópolis: Duplic, 2009.
- BEZERRA, E. Introdução à aprendizagem profunda. **Artigo–31º Simpósio Brasileiro de Banco de Dados–SBBD2016–Salvador**, 2016.
- BONELLI, M. G., FERRINI, M., MANNI, A. Artificial neural networks to evaluate organic and inorganic contamination in agricultural soils. **Chemosphere**, v. 186, p. 124-131, 2017.
- BONFLEUR, E. J. et al. Organomineral interactions and herbicide sorption in Brazilian tropical and subtropical oxisols under no-tillage. **Journal of agricultural and food chemistry**, v. 64, n. 20, p. 3925-3934, 2015.

BORGES, V. K. et al. **Análise de transformações bidimensionais de sinais de vibração para classificação de defeitos e falhas em rolamentos usando Redes Neurais Convolucionais**. 2023.

BOURQUIN, J. et al. Basic concepts of artificial neural networks (ANN) modeling in the application to pharmaceutical development. **Pharmaceutical development and technology**, v. 2, n. 2, p. 95-109, 1997.

BRAGA, A. P., CARVALHO, A. P. L. F., LUDEMIR, T. B. **Redes neurais artificiais: Teoria e aplicações**. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2000.

BRAGA, A.P. et al. **Redes neurais artificiais – Teoria e aplicações**. 2.ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007. 226p.

BRUM, C. S.; FRANCO, A. A.; SCORZA JÚNIOR, R. P. Degradação do herbicida sulfentrazone em dois solos de Mato Grosso do Sul. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 17, p. 558-564, 2013.

BUSCEMA, M. Back propagation neural networks. **Substance use & misuse**, v. 33, n. 2, p. 233-270, 1998.

CAMARGO, A. P. de; SENTELHAS, P. C. Avaliação do desempenho de diferentes métodos de estimativa da evapotranspiração potencial no Estado de São Paulo, Brasil. **Revista Brasileira de agrometeorologia**, v. 5, n. 1, p. 89-97, 1997.

CAMCI, E. et al. An aerial robot for rice farm quality inspection with type-2 fuzzy neural networks tuned by particle swarm optimization-sliding mode control hybrid algorithm. **Swarm and evolutionary computation**, v. 41, p. 1-8, 2018.

CANDEL, A. al. Deep learning with H2O. **H2O. ai Inc**, 2016.

CARA, I. G. et al. Sorption potential of alkaline treated straw and a soil for sulfonylurea herbicide removal from aqueous solutions: An environmental management strategy. **Chemosphere**, v. 186, p. 360-366, 2017.

CARBONARI, C. A. et al. Efeitos de períodos de permanência de clomazone+ hexazinona no solo e na palha de cana-de-açúcar antes da ocorrência de chuvas na eficácia de controle de plantas daninhas. **Planta daninha**, v. 28, n. 1, p. 197-205, 2010.

CARBONARI, C.A.; GOMES, G. L. G. C. ; VELINI, E.D. . Efeitos de períodos sem a ocorrência de chuva na eficácia do flumioxazin aplicado no solo e na palha de cana-de-açúcar. **Revista Brasileira de Herbicidas**, v. 9, p. 81-88, 2010.

CARVALHO, L. B. **Herbicida**. 1ª ed. Editado pelo autor: Lages-SC, 2013.

CAVENAGHI, A.L. et al. Dinâmica do herbicida amicarbazone (Dinamic) aplicado sobre palha de cana-de-açúcar (*Saccharum officinarum*). **Planta Daninha**, v.25, n.4, p.831-837, 2007.

CHEMURA, A. **Modelling spatial variability of coffee (Coffea Arabica L.) crop condition with multispectral remote sensing data**. 2017. Tese de Doutorado.

CHRISTOFFOLETI, P. J. et al. Comportamento dos herbicidas aplicados ao solo na cultura da cana-de-açúcar. **Piracicaba: CP**, v. 2, p. 72, 2009.

COSTA, E. S. M.; BRANDÃO, M. A. dos S. **Redução de amplitude de variáveis categóricas utilizando aprendizado não-supervisionado de máquinas**. 2023.

- COULIBALY, S. et al. Deep neural networks with transfer learning in millet crop images. **Computers in industry**, v. 108, p. 115-120, 2019.
- CRUZ, N. C., GALO, M. de L. B. T. Mapeamento das infestações por plantas aquáticas em reservatórios utilizando imagens multiescala e redes neurais artificiais. **Revista Brasileira de Cartografia**, v. 2, n. 57, 2005.
- CUNHA, L. A. da. **Predição de carga de energia elétrica no Brasil utilizando técnicas de Deep Learning**. 2022.
- DARWISH, A.; HASSANIEN, A. E.; DAS, S.. A survey of swarm and evolutionary computing approaches for deep learning. **Artificial intelligence review**, v. 53, p. 1767-1812, 2020.
- DE CASTRO, F. C. C.; DE CASTRO, M. C. F. **Redes neurais artificiais**. Porto Alegre, RS: Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, 2001.
- DE OLIVEIRA, M. F. et al. Comportamento dos herbicidas no ambiente. **Embrapa Milho e Sorgo-Capítulo em livro científico (ALICE)**, p. 10-138, 2011.
- DOS SANTOS, G. F. M.; MASSANARES, B. F.; DOS SANTOS, A. M. Utilização de biomassas como combustível na produção de cimento Portland. **Revista Intertox de Toxicologia, Risco Ambiental e Sociedade**, v. 12, n. 2, p. 18-18, 2019.
- DUARTE JUNIOR, C.; ESTENSSORO, I.; LIMA, L. da S. **Segmentação de clientes de uma marca de vestuário com algoritmos de aprendizado**. 2021.
- EBRAHIMI, M. et al. Comparison of artificial neural network and multivariate regression models for prediction of Azotobacteria population in soil under different land uses. **Computers and electronics in agriculture**, v. 140, p. 409-421, 2017.
- ESPINHOSA, M. C., GALO, M. de L. B. T. O uso de redes neurais artificiais na análise da ambiguidade entre classes de água e plantas aquáticas. **Boletim de Ciências Geodésicas**, v. 10, n. 2, 2004.
- FARENHORST, A. Importance of soil organic matter fractions in soil-landscape and regional assessments of pesticide sorption and leaching in soil. **Soil Science Society of America Journal**, v.70, n.3, p.1005-1012, 2006.
- FARIA, A. T. et al. Tebuthiuron leaching in three Brazilian soils as affected by soil pH. **Environmental earth sciences**, v. 77, n. 5, p. 214, 2018.
- FARIA, A. T. **Sorção, dessorção, lixiviação e meia-vida do tebuthiuron em latossolos brasileiros**. 2013.
- FERRI, M.V.W., VIDAL, R.A. Eficácia do herbicida acetochlor na semeadura direta e convencional com ou sem palha e os efeitos sobre o rendimento do milho. **Ciência Rural**, v.34, n.2, p.351-356, 2004.
- FIETE, I. R.; FEE, M. S.; SEUNG, H. S. Model of birdsong learning based on gradient estimation by dynamic perturbation of neural conductances. **Journal of neurophysiology**, v. 98, n. 4, p. 2038-2057, 2007.
- FINOCCHIO, M. A. F. Noções de redes neurais artificiais. **Apostila. UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ**, 2014.
- FLECK, L. et al. Redes Neurais Artificiais: Princípios Básicos. **Revista Eletrônica Científica Inovação e Tecnologia**, v. 1, n. 13, p. 47-57, 2016.

- FONTES, M.P.F., CAMARGO, O.A., SPOSITO G. Eletroquímica das partículas coloidais e sua relação com a mineralogia de solos altamente intemperizados. **Scientia Agricola**, v.58, n.3, p.627-646, 2001.
- FORNAROLLI, D.A., RODRIGUES, B.N., LIMA, J., VALÉRIO, M.A. Influência da cobertura morta no comportamento do herbicida atrazine. **Planta Daninha**, v.16, n.2, p.97-107, 1998.
- FREEMAN, J. A.; SKAPURA, D. M. Algorithms, applications, and programming techniques. **Neural Networks. Addison Wesley**, 1991.
- FRITSCH, S.; GUENTHER, F.; GUENTHER, M. F. Package 'neuralnet'. **Training of Neural Networks**, v. 2, p. 30, 2019.
- FUENTES, A. F. et al. High-performance deep neural network-based tomato plant diseases and pests diagnosis system with refinement filter bank. **Frontiers in plant science**, v. 9, p. 1162, 2018.
- FURTADO, M. I. V. **Redes neurais artificiais: uma abordagem para sala de aula**. Ponta Grossa, PR. Atena Editora, p. 19, 2019.
- GÁMIZ, B.; HERMOSÍN, M. C.; CELIS, R. Appraising factors governing sorption and dissipation of the monoterpene carvone in agricultural soils. **Geoderma**, v. 321, p. 61-68, 2018.
- GEBLER, L.; SPADOTTO, C. A. **Comportamento ambiental dos herbicidas**. 2008.
- GÉRARD, F. Clay minerals, iron/aluminum oxides, and their contribution to phosphate sorption in soils—A myth revisited. **Geoderma**, v. 262, p. 213-226, 2016.
- GHOLAMI, V. et al. Spatial soil erosion estimation using an artificial neural network (ANN) and field plot data. **Catena**, v. 163, p. 210-218, 2018.
- GHOSH, P.; KUMPATLA, S. P. GIS applications in agriculture. In: **Geographic Information Systems and Applications in Coastal Studies**. IntechOpen, 2022.
- GIANOLA, D. et al. Predicting complex quantitative traits with Bayesian neural networks: a case study with Jersey cows and wheat. **BMC genetics**, v. 12, n. 1, p. 87, 2011.
- GIORI, F. G. et al. Sugarcane straw management and soil attributes on alachlor and diuron sorption in highly weathered tropical soils. **Journal of Environmental Science and Health, Part B**, v. 49, n. 5, p. 352-360, 2014.
- GIRIOLI, L. S., RIBEIRO, E. M. S. Utilização de Redes Neurais Artificiais para Análise Técnica no Mercado de Ações: Estudo dos Índices IBOVESPA e Dow Jones Industrial Average (DJIA). **Revista EPeQ/FAFIBE**, v. 1, n. 1, p. 150-155, 2009.
- GOULART FARIAS, E. et al. **Aplicação de Rede Neural Artificial para Predição da Qualidade do Efluente Tratado em Wetland Construído Vertical de Fundo Saturado**. 2022.
- GUERRA, N. et al. Persistência de trifloxysulfuron-sodium e pyriithiobac-sodium em diferentes tipos de solo. **Planta Daninha**, v. 29, p. 673-681, 2011.
- GUIMARÃES, P. R. B. Análise de Correlação e medidas de associação. **Curitiba: Universidade Federal do Paraná**, p. 1-26, 2017.
- HAGAN, M. T., DEMUTH, H. B., BEALE, M. **Neural network design**. Boston: PWS Publishing, 1996.

HASSAN-ESFAHANI, L. et al. Spatial Root Zone Soil Water Content Estimation in Agricultural Lands Using Bayesian-Based Artificial Neural Networks and High-Resolution Visual, NIR, and Thermal Imagery. **Irrigation and Drainage**, v. 66, n. 2, p. 273-288, 2017.

HAYKIN, S. **Redes neurais: princípios e prática**. 2.ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.

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

JANIESCH, C.; ZSCHECH, P.; HEINRICH, K. Machine learning and deep learning. **Electronic Markets**, v. 31, n. 3, p. 685-695, 2021.

JI, B. et al. Artificial neural networks for rice yield prediction in mountainous regions. **The Journal of Agricultural Science**, v. 145, n. 3, p. 249-261, 2007.

JIANG, P. et al. Real-time detection of apple leaf diseases using deep learning approach based on improved convolutional neural networks. **IEEE Access**, v. 7, p. 59069-59080, 2019.

JURASZEK, G. D. et al. **Reconhecimento de produtos por imagem utilizando palavras visuais e redes neurais convolucionais**. 2014.

KAMILARIS, A.; PRENAFETA-BOLDÚ, F. X. A review of the use of convolutional neural networks in agriculture. **The Journal of Agricultural Science**, v. 156, n. 3, p. 312-322, 2018

KHANAL, S.; FULTON, J.; SHEARER, S. An overview of current and potential applications of thermal remote sensing in precision agriculture. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 139, p. 22-32, 2017.

KURZWEIL, R. **Como criar uma mente: os segredos do pensamento humano**. Aleph, 2015.

LAMOREAUX, R. J., JAIN, R., HESS, F. D. Efficacy of dimethenamid, metolachlor and encapsulated alachlor in soil covered with crop residue. **Brighton Crop Protection Conference Weeds**, v.3, p.1015-1020, 1993.

LAVORENTI, A., PRATA, F., REGINATO, J.B. Comportamento de pesticidas em solos – fundamentos. **Tópicos de Ciencia do Solo**, v.3, p.335-400, 2003.

LEDELL, E. et al. **R Interface for the 'H2O' Scalable Machine Learning Platform**. Disponível em: <https://cran.r-project.org/web/packages/h2o/h2o.pdf>. Acesso em 17 de jun. de 2019.

LEE, T. L. Back-propagation neural network for long-term tidal predictions. **Ocean Engineering**, v. 31, n. 2, p. 225-238, 2004.

LEK, S.; GUÉGAN, J. F. Artificial neural networks as a tool in ecological modelling, an introduction. **Ecological modelling**, v. 120, n. 2-3, p. 65-73, 1999.

LILLICRAP, T. P. et al. Random synaptic feedback weights support error backpropagation for deep learning. **Nature communications**, v. 7, n. 1, p. 13276, 2016.

LIM, H. A study on dropout techniques to reduce overfitting in deep neural networks. In: **Advanced Multimedia and Ubiquitous Engineering: MUE-FutureTech 2020**. Springer Singapore, 2021. p. 133-139.

- LIU, W. et al. A survey of deep neural network architectures and their applications. **Neurocomputing**, v. 234, p. 11-26, 2017.
- LOCKE, M.A., BRYSON, C.T. Herbicide-soil interactions in reduced tillage and plant residue management systems. **Weed Science**, v.45, n.2, p.307-320, 1997
- LOUX, M.M., LIEBL, R.A., SLIFE, F.W. Availability and persistence of imazaquin, imazethapyr, and clomazone in soil. **Weed Science**, v.37, n.1, p.259-267, 1989.
- LUDERMIR, T. B. Inteligência Artificial e Aprendizado de Máquina: estado atual e tendências. **Estudos Avançados**, v. 35, p. 85-94, 2021.
- LUO, J.; HUANG, J.; LI, H. A case study of conditional deep convolutional generative adversarial networks in machine fault diagnosis. **Journal of Intelligent Manufacturing**, v. 32, p. 407-425, 2021.
- MACIEL, C.D.C., VELINI, E.D. Simulação do caminhamento da água da chuva e herbicidas em palhadas utilizadas em sistemas de plantio direto. **Planta Daninha**, v.23, n.3, p.471-481, 2005.
- MAEDA, E. E. et al. Predicting forest fire in the Brazilian Amazon using MODIS imagery and artificial neural networks. **International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation**, v. 11, n. 4, p. 265-272, 2009.
- MAGGIORI, E. et al. High-resolution aerial image labeling with convolutional neural networks. **IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing**, v. 55, n. 12, p. 7092-7103, 2017.
- MANDAL, U. et al. Optimization of metformin HCl 500 mg sustained release matrix tablets using Artificial Neural Network (ANN) based on Multilayer Perceptrons (MLP) model. **Chemical and Pharmaceutical Bulletin**, v. 56, n. 2, p. 150-155, 2008.
- MARCO-BROWN, J. L. et al. Adsorption of picloram herbicide on montmorillonite: kinetic and equilibrium studies. **Colloids and surfaces A: physicochemical and engineering aspects**, v. 449, p. 121-128, 2014.
- MARIN, C. D. et al. Wash off of herbicide applied on corn residue. **Transactions of the ASAE**, v.21, p.1164-1168, 1978.
- MARTINS, J. G. **Aprendizagem baseada em problemas aplicada a ambiente virtual de aprendizagem**. 2002. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Santa Catarina.
- MCCOOL, C.; PEREZ, T.; UPCROFT, B. Mixtures of lightweight deep convolutional neural networks: Applied to agricultural robotics. **IEEE Robotics and Automation Letters**, v. 2, n. 3, p. 1344-1351, 2017.
- 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, 1943.
- MERCANTE, A. L. P. **Geração de bioeletricidade, através do bagaço e da palha da cana-de-açúcar**. 2021.
- MIA, M. M. A. et al. An algorithm for training multilayer perceptron (MLP) for Image reconstruction using neural network without overfitting. **International Journal of Scientific & Technology Research**, v. 4, n. 02, p. 271-275, 2015.

- MIGUEZ, G. A. **Otimização do algoritmo de Backpropagation pelo uso da função de ativação bi-hiperbólica**. 2012. Tese de Doutorado. Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- MOHAMMED, A. J.; ARIF, M. H.; ALI, A. A. A multilayer perceptron artificial neural network approach for improving the accuracy of intrusion detection systems. **IAES International Journal of Artificial Intelligence**, v. 9, n. 4, p. 609, 2020.
- MONQUERO, P. A. et al. Leaching and persistence of sulfentrazone and imazapic. **Planta daninha**, v. 28, n. 1, p. 185-195, 2010.
- MOREIRA, A., SIQUEIRA, S.C., SILVA, A.A. Adsorvidade do herbicida “zeta” em solos de variadas texturas. **Scientia Agrícola**, v.52, n.3, p.502-508, 1995.
- MUBAREK, A. M.; ADALI, E. Multilayer perceptron neural network technique for fraud detection. In: **2017 International Conference on Computer Science and Engineering (UBMK)**. IEEE, 2017. p. 383-387.
- MUNDT, T. T. **Dinâmica e eficácia do herbicida dicamba quando aplicado no sistema solo e palha**. 2021.
- NAGAOKA, M.E. et al. Um método para estimar densidade de solo utilizando redes neurais artificiais. **Energia na Agricultura**, v.20, p.53-68, 2005.
- NAIME, J. de M. et al. **Conceitos e aplicações da instrumentação para o avanço da agricultura**. 2014.
- NASCIMENTO, J. T. et al. Efeito de leguminosas nas características químicas e matéria orgânica de um solo degradado. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 7, p. 457-462, 2003.
- NASCIMENTO, M. et al. Artificial neural networks for adaptability and stability evaluation in alfalfa genotypes. **Crop Breeding and Applied Biotechnology**, v. 13, n. 2, p. 152-156, 2013.
- NEGRISOLI, E. et al. Associação do herbicida tebuthiuron com a cobertura de palha no controle de plantas daninhas no sistema de cana-crua. **Planta Daninha**, v. 25, p. 621-628, 2007.
- NEGRISOLI, E. ; VELINI, E.D. ; CORREA, M. R. ; ROSSI, C.V.S. ; CARBONARI, C.A. ; COSTA, A.G.F. ; PERIM, L. . Influência da palha e da simulação de chuva sobre a eficácia da mistura formulada clomazone + hexazinone no controle de plantas daninhas em área de cana-crua. **Planta Daninha** (Impresso), v. 29, p. 169-177, 2011.
- NEVES, B. B. **SimNeural: Simulador Computacional de RNA para Aplicações em Ensino e Pesquisas Médicas e Biológicas**. 2012. Tese de Doutorado. Universidade de Brasília.
- NGUYEN, T. T. et al. Monitoring agriculture areas with satellite images and deep learning. **Applied Soft Computing**, v. 95, p. 106565, 2020.
- NISSILA, L. A. **Análise comparativa de métodos computacionais para a classificação de estoque: redes neurais, kNN e SVM**. 2023.
- OLIVEIRA JR., R.S. Mecanismos de ação de herbicidas. In: **Plantas daninhas e seu manejo**. Guaíba: Agropecuária. p.207-255. 2001

- OLIVEIRA, M. F., BRIGHENTI, A. M. Comportamento dos herbicidas no ambiente. In: OLIVEIRA JÚNIOR, R. S., CONSTANTIN, J., INOUE, M. H. (org.). **Biologia e Manejo de Plantas Daninhas**. 1ª ed. Curitiba, PR: Omnipax, p. 263–304. 2011.
- OLIVEIRA, M.F., PRATES, H.T., SANS, L.M.A. Sorção e hidrólise do herbicida flazasulfuron. **Planta Daninha**, v.23, n.1, p.101-113, 2005.
- OLIVEIRA, M.F., SILVA, A.A., NEVES, J.C.L. Influência do tamanho do agregado e do nível de umidade do solo na atividade do flumioxazin. **Revista Ceres**, v.45, n.257, p.81-87, 1998.
- OTTER, D. W.; MEDINA, J. R.; KALITA, J. K. A survey of the usages of deep learning for natural language processing. **IEEE transactions on neural networks and learning systems**, v. 32, n. 2, p. 604-624, 2020.
- PARAÍBA, L. C.; LUIZ, A. J. B.; VIDAL PÉREZ, D. **Estimativa da superfície específica de solos e do coeficiente de sorção de pesticidas**. 2004
- PAROCHETTI, J.V. Soil organic matter effect on activity of acetanilides, CDAA, and atrazine. **Weed Science**, v.21, n.3, p.157-160, 1973.
- PAULA, D. D. de. **Reconstrução de tomossíntese mamária utilizando redes neurais com aprendizado profundo**. 2020.
- PETTER, F. A. et al. Sorption and desorption of diuron in Oxisol under biochar application. **Bragantia**, Campinas-SP, v. 75, n. 4, p. 487-496, 2016.
- PITELLI, R.A., DURIGAN, J.C. Ecologia das plantas daninhas no sistema de plantio direto. In: DIAZ ROSSELLO, R. (coord.): **Siembra directa en Cono Sur**. Montevideo: PROCISUR, p.203-210, 2001.
- PREVIDELLO, B. A. F. et al. O pKa de indicadores ácido-base e os efeitos coloidais. **Química Nova**, v. 29, p. 600-606, 2006.
- RAKHMATULIN, I.; KAMILARIS, A.; ANDREASEN, C. Deep neural networks to detect weeds from crops in agricultural environments in real-time: A review. **Remote Sensing**, v. 13, n. 21, p. 4486, 2021.
- REDDY, K. N. *et al.* Chlorimuron ethyl sorption and desorption kinetics in soil and herbicide-desiccated cover crop residues. **Journal of Agricultural and Food Chemistry**, Easton, v. 43, n. 10, p. 2752-2757, 1995.
- RODRIGUES, B. N. Influência da cobertura morta no comportamento dos herbicidas imazaquin e clomazone. **Planta Daninha**, v. 11, n. 1/2, p. 21-8, 1993.
- RODRIGUES, B. N., ALMEIDA, F. S. **Guia de herbicidas**. 7.ed. Londrina: Edição dos Autores, 2018.
- ROJAS, R. et al. Adsorption study of low-cost and locally available organic substances and a soil to remove pesticides from aqueous solutions. **Journal of hydrology**, v. 520, p. 461-472, 2015.
- ROMANI, L. F. **Aplicação de redes neurais artificiais na sugestão de investimentos**. 2017.
- ROSSI, C.V.S, SALGADO, T.P., ALVES, P.L.C.A., MARQUES JR., J. mobilidade do sulfentrazone no perfil de classes de solos. **Revista Brasileira de Herbicidas**, v.4, n.1, p.65-77, 2005.

- RUMELHART, D. E., HINTON, G. E., WILLIAMS, R. J. **Internal Representation by Error Propagation, in Parellel Distributed Processing.** MIT Press, Cambridge, 1986.
- SAMMOUDA, R. et al. Agriculture satellite image segmentation using a modified artificial Hopfield neural network. **Computers in Human Behavior**, v. 30, p. 436-441, 2014.
- SANTOS, C. F. G. dos; PAPA, J. P. Avoiding overfitting: A survey on regularization methods for convolutional neural networks. **ACM Computing Surveys (CSUR)**, v. 54, n. 10s, p. 1-25, 2022.
- SANTOS, F. A. et al. Potencial da palha de cana-de-açúcar para produção de etanol. **Química nova**, v. 35, p. 1004-1010, 2012.
- SANTOS, F. L., JESUS, V. A. M. de, VALENTE, D. S. M. Modeling of soil penetration resistance using statistical analyses and artificial neural networks. **Acta Scientiarum. Agronomy**, v. 34, n. 2, p. 219-224, 2012.
- SCHNEIDER, P.R. **Análise de regressão aplicada à Engenharia Florestal.** Santa Maria: UFSM/CEPEF, 1998. 236p.
- SELIM, H.M. et al. Herbicide retention in soil as affected by sugarcane mulch residue. **Journal Environmental Quality**, v.32, p.1445-1454, 2003.
- ŠEVO, I.; AVRAMOVIĆ, A. Convolutional neural network based automatic object detection on aerial images. **IEEE geoscience and remote sensing letters**, v. 13, n. 5, p. 740-744, 2016.
- SILVA, A, RAMOS, R., SOUZA, L., RODRIGUES, D., MENDES, J. SIG. **Uma plataforma para introdução de técnicas emergentes no planejamento urbano regional e de transportes: uma ferramenta 3D para análise ambiental urbana: avaliação multicritério, redes neurais artificiais.** São Carlos: Editora dos Autores, 2004.
- SILVA, A. A., VIVIAN, R., OLIVEIRA JÚNIOR, R. S. Herbicidas: Comportamento no Solo. In: SILVA A. A., SILVA J. F. (org.). **Tópicos em manejo integrado de plantas daninhas.** Editora UFV, 2006. p. 155–209.
- SILVA, D. A. da et al. **Rede neural artificial autoregressiva não linear aplicada a dados da estação de medição automática do INMET.** 2021.
- SILVA, I. N., SPATTI, D. H., FLAUZINO, R. A. **Redes Neurais Artificiais para engenharia e ciências aplicadas curso prático.** São Paulo: Artliber, 2010.
- SILVA, S. R.; SCHIMIDT, F. Redução de variáveis de entrada de redes neurais artificiais a partir de dados de análise de componentes principais na modelagem de oxigênio dissolvido. **Química Nova**, v. 39, p. 273-278, 2016.
- SINGH, N.; SINGH, S. B. Sorption-desorption behavior of metsulfuron-methyl and sulfosulfuron in soils. **Journal of Environmental Science and Health, Part B**, v. 47, n. 3, p.168-174, 2012.
- SLADOJEVIC, S. et al. Deep neural networks based recognition of plant diseases by leaf image classification. **Computational intelligence and neuroscience**, v. 2016, 2016.
- SOARES FILHO, M. M. **Redes neurais artificiais: do neurônio artificial à convolução.** 2018.

- SOARES, F. C. et al. Predição da produtividade da cultura do milho utilizando rede neural artificial. **Ciência Rural**, v. 45, p. 1987-1993, 2015.
- SOARES, F. C. et al. Redes neurais artificiais na estimativa da retenção de água do solo. **Ciência Rural**, v. 44, n. 2, p. 293-300, 2014.
- SREELAKSHMI, K.; RAMAKANTHKUMAR, P. Neural networks for short term wind speed prediction. **International Journal of Computer and Information Engineering**, v. 2, n. 6, p. 2019-2023, 2008.
- SUN, R. (Ed.). **The Cambridge Handbook of Computational Cognitive Sciences**. Cambridge University Press, 2023.
- SUTSKEVER, I. et al. On the importance of initialization and momentum in deep learning. In: **International conference on machine learning**. PMLR. p. 1139-1147. , 2013
- TANG, J. et al. Visual navigation control for agricultural robot using serial BP neural network. **Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering**, v. 27, n. 2, p. 194-198, 2011.
- TAULLI, T. **Introdução à Inteligência Artificial: Uma abordagem não técnica**. Novatec Editora, 2020.
- TAYEBI, H. A. et al. Modeling of reactive orange 16 dye removal from aqueous media by mesoporous silica/crosslinked polymer hybrid using RBF, MLP and GMDH neural network models. **Journal of Molecular Structure**, v. 1178, p. 514-523, 2019.
- TOFOLI, G. R. et al. Dinâmica do tebuthiuron em palha de cana-de-açúcar. **Planta daninha**, v. 27, n. 4, p. 815-821, 2009.
- TSAI, C. P.; LEE, T. L. Back-propagation neural network in tidal-level forecasting. **Journal of Waterway, Port, Coastal, and Ocean Engineering**, v. 125, n. 4, p. 195-202, 1999.
- VALENÇA, M. J.S. **Fundamentos das redes neurais: Exemplos em JAVA**. 2ed. Olinda, PE: Livro Rápido, 2010. 386p
- VELINI, E.D. Comportamento de herbicida no solo. In: Simpósio nacional sobre manejo integrado de plantas daninhas em hortaliças, 1992. **Anais...** Botucatu: UNESP, 1992. p.44-64.
- VELINI, E.D., NEGRISOLI, E. Controle de plantas daninhas em cana-crua. In: CONGRESSO BRASILEIRO DA CIÊNCIA DAS PLANTAS DANINHAS, 22., 2000, Foz do Iguaçu. **Palestras...** Londrina: SBCPD, 2000. p.148-164.
- VENTURA, R. V. et al. Uso de redes neurais artificiais na predição de valores genéticos para peso aos 205 dias em bovinos da raça Tabapuã. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, v. 64, n. 2, p. 411-418, 2012.
- VIEIRA, E.M., PRADO, A.G.S., LANDGRAF, M.D., REZENDE, M.O.O. Estudo da adsorção/dessorção do ácido 2,4 diclorofenoxiacético (2,4-D) em solo com ausência e presença de matéria orgânica. **Química Nova**, v.22, n.3, p.305-308, 1999.
- WALKER, A., MOON, Y., WELCH, S.J. Influence of temperature, soil moisture, and soil characteristics on the persistence of alachlor. **Pesticide Science**, v.35, n.2, p.109-116, 1992.

WAUCHOPE, R. D. et al. The SCS/ARA/CES pesticide properties database for environmental decision-making. **Reviews of Environmental Contamination and Toxicology**, v.123, n.1, p.164, 1992.

WIDROW, B., HOFF, M.E. **Adaptive switching circuits**. In: IRE WESCON Convention Record . New York: IRE Press, 1960. p.96-104

WILLMOTT, C. J., DAVIS, R. E., FEDDEMA, J. J., JOHANNES, J., KLINK, K. M., LEGATES, D. R., ROWE, C. M., ACKLESON, S. G., O'DONNELL, J. Statistics for the Evaluation and Comparison of Models. **Journal of Geophysical Research**, v.90, p.8995-9005, 1985.

XIE, B.; ZHANG, H. K.; XUE, J. Deep convolutional neural network for mapping smallholder agriculture using high spatial resolution satellite image. **Sensors**, v. 19, n. 10, p. 2398, 2019.

XU, Z.; SALEH, J. H. Machine learning for reliability engineering and safety applications: Review of current status and future opportunities. **Reliability Engineering & System Safety**, v. 211, p. 107530, 2021.

YAVARI, S. et al. Degradation of imazapic and imazapyr herbicides in the presence of optimized oil palm empty fruit bunch and rice husk biochars in soil. **Journal of hazardous materials**, v. 366, p. 636-642, 2019.

ZHOU, M. M. et al. Artificial neural network models as a decision support tool for selection in sugarcane: a case study using seedling populations. **Crop science**, v. 51, n. 1, p. 21-31, 2011.