

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
FACULDADE DE ENGENHARIA DE BAURU**

EVANDRO SÉRGIO MARCONATO

**ESTIMAÇÃO DE VARIÁVEIS FÍSICO-QUÍMICAS DE SOLO
POR ESPECTROSCOPIA NO VISÍVEL E NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO
ATRAVÉS DE SISTEMAS INTELIGENTES**

BAURU

2011

EVANDRO SÉRGIO MARCONATO

**ESTIMAÇÃO DE VARIÁVEIS FÍSICO-QUÍMICAS DE SOLO
POR ESPECTROSCOPIA NO VISÍVEL E NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO
ATRAVÉS DE SISTEMAS INTELIGENTES**

Dissertação apresentada como requisito à obtenção do título de mestre em Engenharia Elétrica, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, da Faculdade de Engenharia de Bauru, da Universidade Estadual Paulista.

Orientador: Prof. Dr. Paulo José Amaral Serni

BAURU

2011

Marconato, Evandro Sérgio.

Estimação de variáveis físico-químicas de solo por espectroscopia no visível e no infravermelho próximo através de sistemas inteligentes / Evandro Sérgio Marconato, 2011

144 f. : il.

Orientador: Paulo José Amaral Serni

Dissertação (Mestrado)-Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia, Bauru, 2011

1. Análise de solo. 2. Espectroscopia. 3. Redes neurais artificiais. I. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia. II. Título.

ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE EVANDRO SÉRGIO MARCONATO, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA, DO(A) FACULDADE DE ENGENHARIA DE BAURU.

Aos 26 dias do mês de agosto do ano de 2011, às 14:30 horas, no(a) ANFITEATRO DA SEÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO DA FACULDADE DE ENGENHARIA, reuniu-se a Comissão Examinadora da Defesa Pública, composta pelos seguintes membros: Prof. Dr. PAULO JOSE AMARAL SERNI do(a) Departamento de Engenharia Elétrica / Faculdade de Engenharia de Bauru - UNESP, Prof. Dr. ROBERTO LYRA VILLAS BOAS do(a) Departamento de Recursos Naturais Ciência do Solo / Faculdade de Ciências Agrônômicas de Botucatu - UNESP, Prof. Dr. JOSE ALFREDO COVOLAN ULSON do(a) Departamento de Engenharia Elétrica / Faculdade de Engenharia de Bauru - UNESP, sob a presidência do primeiro, a fim de proceder a arguição pública da DISSERTAÇÃO DE MESTRADO de EVANDRO SÉRGIO MARCONATO, intitulado "IDENTIFICAÇÃO DE VARIÁVEIS FÍSICO-QUÍMICAS DE SOLO POR MEIO DE ESPECTROMETRIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO E SISTEMAS INTELIGENTES". Após a exposição, o discente foi arguido oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo recebido o conceito final: APROVA DO. Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que, após lida e aprovada, foi assinada pelos membros da Comissão Examinadora.

Prof. Dr. PAULO JOSE AMARAL SERNI

Prof. Dr. ROBERTO LYRA VILLAS BOAS

Prof. Dr. JOSE ALFREDO COVOLAN ULSON

PROPOSTA DE ALTERAÇÃO DO TÍTULO

A BANCA EXAMINADORA PROPÕE A ALTERAÇÃO DO TÍTULO DO ALUNO: **EVANDRO SÉRGIO MARCONATO**

DE: "IDENTIFICAÇÃO DE VARIÁVEIS FÍSICO-QUÍMICAS DE SOLO POR MEIO DE ESPECTROMETRIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO E SISTEMAS INTELIGENTES"

PARA:

ESTIMAÇÃO DE VARIÁVEIS FÍSICO-QUÍMICAS DE
SOLO POR ESPECTROSCOPIA NO VISÍVEL E NO
INFRAVERMELHO PRÓXIMO ATRAVÉS DE
SISTEMAS INTELIGENTES.

Bauru, 26 de agosto de 2011


Prof. Dr. PAULO JOSE AMARAL SERNI
Orientador

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter me proporcionado força para conciliar as atividades de minha profissão com os assuntos acadêmicos.

A minha esposa Renata, pela paciência e compreensão.

Ao Prof. Dr. Sakae Shibusawa, por ter gentilmente cedido a base de dados utilizada neste trabalho.

Ao colega de empresa Denis Yukio Sakuma, pela preciosa ajuda na interpretação das informações relacionadas com seu mestrado no Japão e que foram fundamentais para este trabalho.

Ao Prof. Dr. Paulo José Amaral Serni e ao Prof. Dr. José Alfredo Covolan Ulson, pela orientação e apoio.

Ao colega de mestrado Edson Lucio Domingues, pelo companheirismo e perseverança quando parecia que não iríamos conseguir atingir nossos objetivos.

Aos colegas de empresa Cristiano Okada Pontelli, Nelson Félix de Lima Júnior, Rodrigo Marcon Sanches e Rodolfo Castanho Fernandes, por terem auxiliado positivamente nas discussões que envolveram a análise dos resultados obtidos neste trabalho.

RESUMO

O agronegócio possui participação fundamental no cenário econômico brasileiro, com reflexos importantes sobre o produto interno bruto, as exportações e a geração de empregos. A viabilidade econômica do setor agropecuário a partir da redução dos custos de produção, do aumento de produtividade e da redução do impacto ambiental causado pelo excesso de insumos, depende da Agricultura de Precisão. As informações referentes à variabilidade de diferentes propriedades do solo dentro da lavoura são fundamentais no processo de tomada de decisão. Uma das limitações da Agricultura de Precisão, a incapacidade de se obter as propriedades do solo de maneira rápida e com baixo custo, tem levado pesquisadores a desenvolver sensores para análise de solo em tempo real, sendo a espectroscopia uma das técnicas utilizadas. Neste trabalho, redes neurais artificiais (RNA) foram utilizadas como ferramenta inteligente para, a partir de uma massa de dados fornecida por um sensor de solo em tempo real que utiliza a técnica da espectroscopia, estimar os teores de nitrogênio total e umidade do solo. O trabalho apresenta também uma comparação entre o resultado da estimação das redes neurais artificiais e o resultado da estimação de um *software* de análise quimiométrica utilizando a mesma massa de dados. O desempenho apresentado pelas redes neurais artificiais mostra ser possível sua utilização como ferramenta alternativa aos *softwares* de análise quimiométrica, além de permitir embarcar a inteligência de estimação, o que pode ser um passo preliminar para o desenvolvimento de equipamentos de baixo custo para análise de solo em tempo real.

Palavras-chave: Análise de solo. Espectroscopia. Redes neurais artificiais.

ABSTRACT

Agribusiness has a fundamental role in the Brazilian economy, with important consequences on the gross domestic product, exports and job generation. The economic viability of the agricultural sector by reducing production costs, increasing productivity and reducing the environmental impact caused by excessive inputs, depends on Precision Agriculture. Information concerning the variability of different soil properties within the crop is essential in the process of decision making. One of the limitations of Precision Agriculture, the inability to obtain the soil characteristics quickly and cost effectively, has led researchers to develop sensors for soil analysis in real time, using the technique of spectroscopy. This work used artificial neural networks (ANN) as a smart tool for estimating the total nitrogen content and soil moisture from data provided by a real time soil sensor using the technique of spectroscopy. This work also presents a comparison between the estimation results of the artificial neural networks and the estimation results of a chemometric analysis software using the same database. The performance of the neural networks shows its possible use as an alternative tool to chemometric analysis software and allows the estimative intelligence to be embedded, which may be a preliminary step for the development of low-cost equipment for real-time soil analysis.

Keywords: Soil analysis. Spectroscopy. Artificial neural networks.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema de amostragem de solo ao acaso	21
Figura 2 – Esquema de amostragem de solo sistematizada	22
Figura 3 – Custo (R\$) da amostragem de solo sistematizada em função da resolução da grade para uma área de 40 ha	22
Figura 4 – Equipamentos para amostragem de solo manual.	23
Figura 5 – Equipamento para amostragem de solo automatizada.....	23
Figura 6 – O espectro eletromagnético	25
Figura 7 – Reflexão difusa	26
Figura 8 – Unidade sensora do sensor RTSS	29
Figura 9 – Sensor RTSS acoplado a um trator	30
Figura 10 – Calibração multivariada em espectroscopia	31
Figura 11 – Efeito da análise derivativa no espectro de absorbâncias de duas amostras.....	32
Figura 12 – Configuração de regressão PLS no UNSCRAMBLER	33
Figura 13 – Configuração do método de validação cruzada no UNSCRAMBLER	34
Figura 14 – Gráfico de regressão linear gerado pelo UNSCRAMBLER	34
Figura 15 – Sensor RTSS utilizado para levantamento da base de dados	38
Figura 16 – Absorbância versus Comprimento de Onda (Original).	53
Figura 17 – Absorbância versus Comprimento de Onda (Útil).	54
Figura 18 – Absorbância versus Comprimento de Onda (<i>Smooth</i>).	55
Figura 19 – Espectro resultante da aplicação da derivada segunda.	56
Figura 20 – Regressão linear para o conjunto de validação – TN (Rede PMC - Método 1)....	85
Figura 21 – Regressão linear para o conjunto de validação – MC (Rede PMC – Método 1). .	86
Figura 22 – Regressão linear para o conjunto de validação – TN (Rede PMC – Método 3)...	86
Figura 23 – Comportamento dos índices R^2 e RMSE em função do número de épocas do treinamento (TN validação - Rede PMC - Método 3).	87

Figura 24 – Regressão linear para o conjunto de validação – MC (Rede PMC – Método 3).	87
Figura 25 – Comportamento dos índices R^2 e RMSE em função do número de épocas do treinamento (MC validação - Rede PMC - Método 3).	88
Figura 26 – Estrutura da base de dados (Trecho 1).	96
Figura 27 – Estrutura da base de dados (Trecho 2).	97
Figura 28 – Modelo do neurônio artificial.	123
Figura 29 – Função degrau.	124
Figura 30 – Função degrau (bipolar).	124
Figura 31 – Função rampa.	125
Figura 32 – Função sigmóide.	125
Figura 33 – Função tangente hiperbólica.	126
Figura 34 – Organização em camadas da rede neural artificial.	126
Figura 35 – Rede alimentada adiante com camada única.	127
Figura 36 – Rede alimentada adiante com múltiplas camadas.	128
Figura 37 – Rede recorrente.	129
Figura 38 – Diagrama esquemático da rede <i>Perceptron</i> multicamadas.	134
Figura 39 – Diagrama esquemático da rede função de base radial.	142

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 1).....	57
Tabela 2 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).....	58
Tabela 3 – Estimação de TN para rede PMC com duas camadas escondidas e erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 1).....	59
Tabela 4 – Estimação de TN para rede PMC com duas camadas escondidas e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).....	60
Tabela 5 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 2).....	61
Tabela 6 – Estimação de TN para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 1)....	62
Tabela 7 – Estimação de TN para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1)....	63
Tabela 8 – Estimação de TN para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 2)....	64
Tabela 9 – Estimação de MC para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).	65
Tabela 10 – Estimação de MC para rede PMC com duas camadas escondidas e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).....	66
Tabela 11 – Estimação de MC para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 2).....	67
Tabela 12 – Estimação de MC para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 1). 68	
Tabela 13 – Estimação de MC para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1). 69	
Tabela 14 – Estimação de MC para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 2). 70	
Tabela 15 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida (Método 3).	71
Tabela 16 – Estimação de TN para rede PMC com duas camadas escondidas (Método 3). ...	72
Tabela 17 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida (Método 4).....	73
Tabela 18 – Estimação de TN para rede RBF (Método 3).	74
Tabela 19 – Estimação de TN para rede RBF (Método 4).	75
Tabela 20 – Estimação de MC para rede PMC com uma camada escondida (Método 3).	76

Tabela 21 – Estimação de MC para rede PMC com duas camadas escondidas (Método 3)....	77
Tabela 22 – Estimação de MC para rede PMC com uma camada escondida (Método 4).	78
Tabela 23 – Estimação de MC para rede RBF (Método 3).	79
Tabela 24 – Estimação de MC para rede RBF (Método 4).	80
Tabela 25 – Comparação entre as redes neurais na estimação de TN (Método 1).	81
Tabela 26 – Comparação entre as redes neurais na estimação de TN (Método 2).	81
Tabela 27 – Comparação entre as redes neurais na estimação de MC (Método 1).	81
Tabela 28 – Comparação entre as redes neurais na estimação de MC (Método 2).	82
Tabela 29 – Comparação entre as redes neurais e o <i>software</i> UNSCRAMBLER (R^2) – Métodos 1 e 2.....	82
Tabela 30 – Comparação entre a rede neural PMC e o <i>software</i> UNSCRAMBLER (RMSE) – Métodos 1 e 2.....	82
Tabela 31 – Comparação entre as redes neurais na estimação de TN (Método 3).	83
Tabela 32 – Comparação entre as redes neurais na estimação de TN (Método 4).	83
Tabela 33 – Comparação entre as redes neurais na estimação de MC (Método 3).	83
Tabela 34 – Comparação entre as redes neurais na estimação de MC (Método 4).	84
Tabela 35 – Comparação entre as redes neurais e o <i>software</i> UNSCRAMBLER (R^2) – Métodos 3 e 4.....	84
Tabela 36 – Comparação entre a rede neural PMC e o <i>software</i> UNSCRAMBLER (RMSE) – Métodos 3 e 4.....	84

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANFIS	<i>Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System</i> (Sistema de Inferência <i>Neuro-Fuzzy</i> Adaptativo)
CEPEA	Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada da Universidade de São Paulo
EMBRAPA	Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária
GPS	<i>Global Positioning System</i> (Sistema de Posicionamento Global)
IAC	Instituto Agronômico de Campinas
MC	<i>Moisture Content</i> (Teor de Umidade)
NIR	<i>Near Infra Red</i> (Infravermelho Próximo)
PIB	Produto Interno Bruto
PLS	<i>Partial Least Squares</i> (Mínimos Quadrados Parciais)
PMC	<i>Perceptron</i> Multicamadas
RBF	<i>Radial Basis Function</i> (Função de Base Radial)
RMSE	<i>Root Mean Square Error</i> (Raiz do Erro Quadrático Médio)
RNA	Redes Neurais Artificiais
RTSS	<i>Real-Time Soil Sensor</i> (Sensor de Solo em Tempo Real)
SOM	<i>Soil Organic Matter</i> (Quantidade de Matéria Orgânica no Solo)
TN	<i>Total Nitrogen</i> (Nitrogênio Total)
VIS	<i>Visible</i> (Visível)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Motivações da Dissertação	14
1.2	Objetivo da Dissertação	16
1.3	Estrutura da Dissertação	17
2	INVESTIGAÇÃO TÉCNICO-CIENTÍFICA	18
2.1	Análise de Solo	18
2.1.1	Exemplos de propriedades físico-químicas importantes	18
2.1.2	Amostragem de solo	20
2.1.3	Sensores de solo em tempo real	24
2.2	Espectroscopia por Refletância Difusa na Análise de Propriedades do Solo	25
2.2.1	Conceitos sobre espectroscopia por refletância difusa	25
2.2.2	Aplicações da espectroscopia VIS-NIR na análise de solo	27
2.2.3	Abordagem quimiométrica	30
2.3	Sistemas Inteligentes Baseados em Redes Neurais Artificiais	35
3	MATERIAIS E MÉTODOS	37
3.1	Equipamentos	37
3.2	Ferramentas Computacionais	37
3.3	Base de Dados	37
3.4	Metodologia	39
3.4.1	Método 1 – Treinamento com única interrupção sem tratamento derivativo	40
3.4.2	Método 2 – Treinamento com única interrupção e tratamento derivativo	43
3.4.3	Método 3 – Treinamento com várias interrupções sem tratamento derivativo	45
3.4.4	Método 4 – Treinamento com várias interrupções e tratamento derivativo	48
3.4.5	Índices de desempenho	51
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	53
4.1	Pré-Tratamento do Espectro de Absorbâncias	53
4.2	Nitrogênio Total – Método 1 (Rede PMC)	56
4.3	Nitrogênio Total – Método 2 (Rede PMC)	61
4.4	Nitrogênio Total – Método 1 (Rede RBF)	61
4.5	Nitrogênio Total – Método 2 (Rede RBF)	64
4.6	Umidade – Método 1 (Rede PMC)	64
4.7	Umidade – Método 2 (Rede PMC)	67
4.8	Umidade – Método 1 (Rede RBF)	67
4.9	Umidade – Método 2 (Rede RBF)	70
4.10	Nitrogênio Total – Método 3 (Rede PMC)	70
4.11	Nitrogênio Total – Método 4 (Rede PMC)	73
4.12	Nitrogênio Total – Método 3 (Rede RBF)	73
4.13	Nitrogênio Total – Método 4 (Rede RBF)	75
4.14	Umidade – Método 3 (Rede PMC)	75
4.15	Umidade – Método 4 (Rede PMC)	78
4.16	Umidade – Método 3 (Rede RBF)	78
4.17	Umidade – Método 4 (Rede RBF)	80
4.18	Comparativos	80
4.18.1	Comparativos para os métodos 1 e 2	81
4.18.2	Comparativos para os métodos 3 e 4	82
4.19	Gráficos Ilustrativos	84
5	CONCLUSÕES	89
5.1	Conclusões Gerais	89
5.2	Sugestões de Continuidade	90
	REFERÊNCIAS	91
	APÊNDICE A – ESTRUTURA DA BASE DE DADOS	96
	APÊNDICE B – <i>SOFTWARES</i> DESENVOLVIDOS NO MATLAB	98
	B.1 Método 1 – Treinamento com Única Interrupção sem Tratamento Derivativo	98
	B.2 Método 2 – Treinamento com Única Interrupção e Tratamento Derivativo	102
	B.3 Método 3 – Treinamento com Várias Interrupções sem Tratamento Derivativo	108

B.4 Método 4 – Treinamento com Várias Interrupções e Tratamento Derivativo	114
APÊNDICE C – REDES NEURAIS ARTIFICIAIS.....	122
C.1 Modelo do Neurônio Artificial	122
C.2 Topologias das Redes Neurais Artificiais.....	126
C.3 Treinamento das Redes Neurais Artificiais	129
C.3.1 Considerações gerais.....	129
C.3.2 Etapas do treinamento.....	130
C.4 Rede <i>Perceptron</i> Multicamadas (PMC)	132
C.4.1 Algoritmo <i>backpropagation</i>	133
C.4.2 Algoritmo de Levenberg-Marquardt	138
C.4.3 Algoritmo de Levenberg regularizado	141
C.5 Rede Função de Base Radial (RBF).....	142
C.5.1 Algoritmo de treinamento para a rede RBF	143

1 INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta as motivações e o objetivo deste trabalho de pesquisa.

1.1 Motivações da Dissertação

Terras férteis e extensas aliadas a um clima propício para a agricultura, tornam o Brasil um dos principais produtores e fornecedores mundiais de alimentos. Segundo o Ministério da Agricultura (2011), o país vem apresentando um crescimento singular no comércio internacional do agronegócio, tanto que, no início de 2010, um em cada quatro produtos desta atividade circulando no mundo eram brasileiros.

Segundo o Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada da Universidade de São Paulo (CEPEA, 2009), o agronegócio é responsável por aproximadamente 25% do Produto Interno Bruto (PIB) brasileiro. O agronegócio também responde por aproximadamente 38% das exportações totais brasileiras e 39% dos empregos gerados no mercado interno (MINISTÉRIO DA AGRICULTURA, 2011).

Segundo Franco (2011) e Cruvinel (2004), um dos pilares fundamentais para a consolidação do agronegócio brasileiro é a tecnologia.

Balastreire (2000) cita que uma das únicas formas de o setor agropecuário se manter economicamente viável é reduzir o custo de produção, aumentando ao mesmo tempo a produtividade das culturas.

Os recentes avanços tecnológicos que marcaram as últimas décadas permitiram que a agricultura desenvolvesse um verdadeiro arsenal de conhecimento e de técnicas de produção e de gerenciamento. E foi exatamente tal avanço tecnológico que criou condições para a expansão da Agricultura de Precisão.

Segundo Coelho (2005), a variabilidade dos solos, o clima, a diversidade de culturas, o desempenho de máquinas agrícolas e insumos são aspectos englobados pela Agricultura de Precisão.

Pierce e Nowak (1999 apud COELHO, 2005) definem a Agricultura de Precisão como a utilização de tecnologias para manejo da variabilidade espacial e temporal das culturas como forma de melhorar as técnicas de gerenciamento, visando aumentar a rentabilidade da lavoura, a qualidade do produto e proteger o meio ambiente.

Adamchuk et al. (2004) estabelecem que as informações referentes à variabilidade de diferentes propriedades do solo dentro da lavoura são fundamentais no processo de tomada de

decisão. Porém uma das grandes limitações da Agricultura de Precisão é a incapacidade de se obter as propriedades do solo de maneira rápida e com baixo custo. Vários pesquisadores e fabricantes têm tentado desenvolver sensores para determinação em tempo real das propriedades físicas e químicas do solo.

Os sensores de solo em tempo real, também conhecidos pela sigla RTSS (*real-time soil sensor*) utilizam diferentes princípios de medição. Vários estudos têm sido desenvolvidos utilizando a técnica de espectroscopia, onde as propriedades de uma amostra de solo seriam determinadas pela análise de sua refletância a algum tipo de radiação.

No universo da utilização da técnica da espectroscopia para determinação de propriedades do solo, a relação entre as refletâncias e uma propriedade específica não é explícita e tende a ser não linear. Essa característica possibilita a utilização de Sistemas Inteligentes baseados em Redes Neurais Artificiais (RNA) como ferramenta para mapeamento da relação entre refletâncias e propriedades do solo. Além disso, a capacidade de generalização do conhecimento apresentada pelas redes neurais artificiais, permite extrapolar esse mapeamento para aplicações em tempo real.

1.2 Objetivo da Dissertação

Este trabalho tem como objetivo apresentar um estudo sobre a utilização de Sistemas Inteligentes baseados em Redes Neurais Artificiais para determinação em tempo real de propriedades físicas e químicas do solo a partir de informações fornecidas pela técnica de espectroscopia.

Especificamente, foram avaliados os desempenhos de dois tipos de redes neurais artificiais na estimação dos teores de nitrogênio total e umidade do solo, a partir de uma base de dados com informações de espectroscopia geradas por um sensor de solo em tempo real utilizado em um trabalho de pesquisa agrícola experimental no Japão. Os resultados obtidos pelas redes neurais artificiais foram então comparados aos resultados fornecidos por um *software* específico para interpretação de informações geradas por espectroscopia quando submetido à mesma base de dados.

No enfoque da Agricultura de Precisão, ferramentas baseadas na amostragem em tempo real para investigação da variabilidade das propriedades do solo com maior grau de detalhamento e confiabilidade são importantes para o aumento da produtividade e para a redução de tempo, custos e impactos ambientais. Este trabalho também objetiva ser um passo preliminar para o desenvolvimento de equipamentos de baixo custo para análise de solo em tempo real.

1.3 Estrutura da Dissertação

Esta dissertação está estruturada da seguinte forma:

- O Capítulo 1 apresenta as motivações e o objetivo para o desenvolvimento do trabalho;
- O Capítulo 2 apresenta um estudo sobre aspectos relevantes relacionados com a análise de solo, destacando a importância de algumas propriedades do solo para a agricultura. São apresentados conceitos sobre espectroscopia e exemplos atuais de utilização dessa técnica na análise de solo. São apresentados conceitos e utilização de técnicas quimiométricas no tratamento de dados oriundos da aplicação da técnica da espectroscopia. São apresentadas também definições sobre sistemas inteligentes, redes neurais artificiais e exemplos atuais de sua aplicação na agricultura;
- O Capítulo 3 apresenta materiais, base de dados e metodologia utilizados no trabalho;
- O Capítulo 4 contém resultados e discussões pertinentes relacionados com cada método previsto na metodologia, bem como análises comparativas entre eles;
- O Capítulo 5 apresenta as conclusões do trabalho e sugestões de continuidade para trabalhos futuros.
- Os apêndices aprofundam as informações sobre a base de dados, redes neurais artificiais e apresentam os *softwares* desenvolvidos em MATLAB que foram utilizados no trabalho.

2 INVESTIGAÇÃO TÉCNICO-CIENTÍFICA

Este capítulo apresenta conceitos sobre análise de solo, espectroscopia e sistemas inteligentes baseados em redes neurais artificiais, bem como as definições necessárias para o entendimento do presente trabalho.

2.1 Análise de Solo

Esta seção apresenta conceitos relacionados com a análise de solo, a partir de exemplos de propriedades físico-químicas importantes de serem determinadas, técnicas de amostragem de solo e tipos de sensores de solo em tempo real.

2.1.1 Exemplos de propriedades físico-químicas importantes

O conceito de qualidade do solo está relacionado com suas propriedades biológicas, químicas e físicas, processos e a interação entre eles (KARLEN et al., 2003). Segundo Parr et al. (1992 apud VIEIRA; SILVA, 2003), a qualidade do solo está relacionada com:

- Produtividade;
- Qualidade e segurança dos alimentos;
- Saúde humana e animal;
- Qualidade ambiental.

Santos (2007) aponta a degradação do solo como um dos mais graves problemas ambientais na atualidade, tendo influência no custo ambiental e econômico da produção agrícola.

A Agricultura de Precisão, de acordo com Coelho (2005), tem como premissa o manejo da variabilidade dos solos e culturas no espaço e no tempo. Ela é uma técnica que pode ser utilizada para melhorar o manejo do solo, permitindo sua utilização de forma sustentável.

Segundo a Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (EMBRAPA, 2011), o manejo adequado do solo está relacionado com a análise de suas propriedades. A partir dos

resultados obtidos na análise, será feita a recomendação para a adubação (correção da quantidade de nutrientes) e calagem (correção da acidez), por exemplo.

Como exemplo de propriedades de solo importantes de serem medidas, podem ser citadas a quantidade de matéria orgânica (SOM – *soil organic matter*), o teor de umidade (MC – *moisture content*), nível de acidez (pH) e nitrogênio total (TN - *total nitrogen*).

Conceição et al. (2005 apud ZALAMENA, 2008) consideram a quantidade de matéria orgânica um indicador eficiente da qualidade do solo induzida por sistemas de manejo. Song e He (2005) apontam a quantidade de matéria orgânica como um indicador da fertilidade dos solos. A quantidade de matéria orgânica também está relacionada com a formação de componentes da estrutura dos solos (agregados), agindo como agente cimentante das partículas que formam tais componentes (BASTOS et al., 2005).

A água é um veículo para transporte de nutrientes solúveis, além de estar relacionada com a temperatura e aeração (ventilação) do solo. Segundo Tetyuev et al. (2006) e Marciano (1998 apud NASCIMENTO, 2010), o conhecimento do teor de umidade do solo é fundamental na determinação da quantidade necessária de água em áreas irrigadas, onde muitas vezes ocorre desperdício do líquido e perda de nutrientes solúveis. Kaleita et al. (2005) apontam uma contribuição significativa do teor de umidade do solo na produtividade da lavoura.

Miguel et al. (2010) correlacionaram o pH do solo com a produtividade em lavouras de cana-de-açúcar. Correia (2009) aponta a acidez do solo como um dos principais responsáveis pela baixa produtividade das culturas.

Malavolta e Moraes (2006) afirmam que a vida das plantas depende da manutenção de uma concentração adequada do nitrogênio em seus tecidos. Segundo Cotta et al. (2006), o nitrogênio, dentre os nutrientes minerais de plantas, é o que mais limita a produtividade agrícola por fazer parte da estrutura de grande número de compostos vitais aos vegetais. No solo, o nitrogênio pode ser encontrado nas formas orgânica (proteínas, aminoácidos e uréia) e inorgânica (amônio e nitrato). O termo nitrogênio total refere-se à combinação de nitrogênio orgânico e inorgânico. A grande maioria do nitrogênio é absorvida pelas plantas na forma inorgânica.

Amaral (2010) cita que, embora o nitrogênio seja um dos nutrientes de utilização mais rotineira, ele merece atenção especial devido ao custo relativamente elevado e devido também ao fato de os fertilizantes nitrogenados freqüentemente serem utilizados de forma inadequada. A utilização inadequada do nitrogênio é resultado da variabilidade dos processos de mineralização (transformação do nitrogênio orgânico em inorgânico), lixiviação (lavagem

da parte superficial do solo pelo escoamento da água), desnitrificação (emissão de nitrogênio na forma gasosa) e absorção pela lavoura.

A utilização de dosagens inadequadas de fertilizantes nitrogenados pode levar ao excesso de nitrogênio na planta, gerando problemas na constituição dos tecidos vegetais (COTTA et al., 2006). Para o meio ambiente, o excesso de nitrogênio, especialmente na forma de nitrato, promove o crescimento de plantas aquáticas em rios e lagos, tornando a água inadequada para uso doméstico e reduzindo sua quantidade de oxigênio, o que causa mortalidade nos peixes e desequilíbrio ecológico. Altas doses de nitrato também podem ser tóxicas para a saúde humana (VELOSO, 2006). Logo, o manejo adequado do nitrogênio é fundamental para a sustentabilidade da agricultura.

2.1.2 Amostragem de solo

A análise de solo laboratorial convencional trabalha com amostras de solo retiradas de áreas específicas da lavoura. Devido à heterogeneidade do solo, a amostragem não é uma prática simples e deve ser executada seguindo instruções com base científica. Por exemplo, uma amostra de solo de 0,50 kg que foi retirada de uma área de 10 ha representa somente uma parte em 40 milhões da camada arável (camada que consegue ser modificada com a utilização de implementos agrícolas), considerando-se uma profundidade de 20 cm para a camada e o solo com densidade global unitária. (EMBRAPA, 2006).

Adamchuk et al. (2004) classificaram os critérios de seleção das áreas de onde serão retiradas as amostras de solo em três categorias: randômica, onde as amostras são obtidas de áreas aleatórias dentro da lavoura; adaptativa, onde as amostras são retiradas de áreas determinadas a partir de informação dos anos anteriores e amostragem por *grids*, onde as amostras são levantadas a partir de áreas pré-determinadas. O uso de sistemas GPS (*global positioning system*) permite relacionar a coordenada geográfica da área fornecedora da amostra com as quantidades de nutrientes medidas, o que leva à geração de mapas de prescrição dos nutrientes.

A EMBRAPA (2006) divide a amostragem de solo em duas categorias: ao acaso e sistematizada. A amostragem ao acaso é recomendada para a agricultura convencional, já a amostragem sistematizada é recomendada para aplicações de tecnologias voltadas para a Agricultura de Precisão.

Na amostragem ao acaso, a área onde será feita a coleta das amostras deve ser dividida em unidades de, no máximo, 10 ha. Essas unidades devem ser homogêneas em

relação ao tipo de solo, vegetação e utilização anterior. Durante a amostragem, essas unidades devem ser percorridas em zigue-zague, sendo retiradas 20 amostras que posteriormente devem ser misturadas formando uma amostra de 0,50 kg referente a uma unidade e que será enviada para análise laboratorial. A Figura 1 ilustra o processo de amostragem descrito.

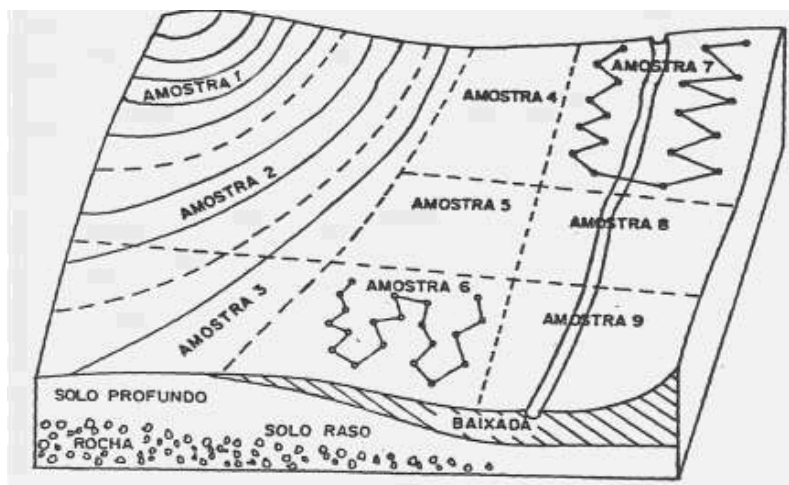


Figura 1 – Esquema de amostragem de solo ao acaso (EMBRAPA, 2006).

Na amostragem sistematizada, a área onde será feita a coleta das amostras deve ser dividida em grades (*grids*) quadradas ou retangulares. Dentro de cada grade, a amostragem pode ser feita ao acaso ou de forma pontual, num raio de 3 a 6 m de um ponto de referência. As amostras coletadas dentro de cada grade devem ser misturadas posteriormente formando a amostra da grade que será enviada para análise laboratorial. A Figura 2 ilustra o processo de amostragem descrito para uma área dividida em grades (células) de 100 m x 100 m, com cinco pontos de amostragem por grade. A Figura 3 mostra o custo de amostragem em função da resolução da grade, considerando uma área de 40 ha e custo de mão-de-obra de R\$2,00/hora.

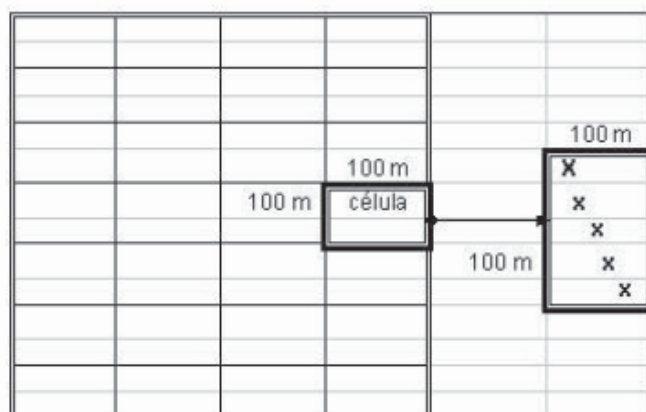


Figura 2 – Esquema de amostragem de solo sistematizada (EMBRAPA, 2006).

Número de amostras	Tempo (horas)	Espaçamento da grade (m)			
		140 (1,96 ha)	91 (0,83 ha)	60 (0,36 ha)	30 (0,09 ha)
20	2	4,00			
48	6		12,00		
106	11			22,00	
436	36				72,00

Figura 3 – Custo (R\$) da amostragem de solo sistematizada em função da resolução da grade para uma área de 40 ha (EMBRAPA, 2006).

A Figura 4 mostra diversos equipamentos utilizados para coleta manual das amostras de solo. Equipamentos mais automatizados equipados com unidades hidráulicas e sistema GPS também são utilizados pelos agricultores para a amostragem do solo (Figura 5).



Figura 4 – Equipamentos para amostragem de solo manual.
(Fonte: www.reoterm.com.br/central/Analise_Solo_Meteorologica/ugt.htm)



Figura 5 – Equipamento para amostragem de solo automatizada.
(Fonte: www.tecnoparts.agr.br/servicos/amostragem-de-solo)

Segundo dados do Instituto Agrônomo de Campinas (IAC, 2010), o custo de uma análise laboratorial para estimar a fertilidade do solo pode variar de R\$18,00 a R\$50,00 por amostra analisada. O prazo mínimo para o envio dos resultados é de 10 dias.

2.1.3 Sensores de solo em tempo real

Lowenberg-DeBoer (2004) cita que, embora a análise das propriedades do solo em tempo real seja uma alternativa vislumbrada desde 1980, a grande maioria das ferramentas comerciais para aplicação de nutrientes é baseada em mapas de prescrição. A principal vantagem da análise em tempo real, sob o ponto de vista econômico, é que ela elimina a necessidade da criação de mapas de prescrição bem como todo o tempo de gerenciamento que esta etapa consome. Além disso, as propriedades do solo podem variar numa resolução espacial mais fina que aquela utilizada para a retirada das amostras. Uma análise laboratorial com resolução fina não é prática devido ao custo e tempo de coleta, então é preferível substituir a análise laboratorial convencional pela abordagem em tempo real, permitindo assim uma caracterização mais confiável da variação das propriedades do solo, com redução de custo e tempo (LEE et al., 2008).

No enfoque da análise em tempo real, Adamchuk et al. (2004) classificaram os sensores de solo em tempo real nas seguintes categorias:

- Sensores elétrico-eletromagnéticos, que medem as variações de resistência/condutividade, capacitância ou indutância geradas pela composição físico-química do solo;
- Sensores ópticos, que utilizam ondas eletromagnéticas para detectar o nível de energia refletida ou absorvida que é gerado pela composição físico-química do solo;
- Sensores mecânicos, que medem as forças resultantes de ferramentas específicas acopladas ao solo para determinar o grau de compactação;
- Sensores acústicos, que medem a intensidade do som produzida por ferramentas específicas interagindo com o solo para determinar textura e compactação;
- Sensores pneumáticos, que medem a pressão necessária para injetar um fluxo de ar no solo para determinar estrutura e compactação;

- Sensores eletroquímicos, que utilizam membranas íon-seletivas ou transistores de efeito de campo íon-seletivos (ISFET - *ion-selective field effect transistor*), capazes de gerar sinais elétricos como resposta à atividade de íons específicos do solo (íons de nitrato ou hidrogênio, por exemplo).

Uma das abordagens mais frequentes na Agricultura de Precisão é a utilização de sensores ópticos, que determinam a quantidade de energia refletida pela superfície do solo em uma faixa específica do espectro eletromagnético.

2.2 Espectroscopia por Refletância Difusa na Análise de Propriedades do Solo

Esta seção apresenta conceitos relacionados com a técnica da espectroscopia por refletância difusa, além de mostrar como a aplicação dessa técnica, em conjunto com a abordagem quimiométrica, vem sendo utilizada para análise de propriedades do solo, inclusive para aplicações em tempo real.

2.2.1 Conceitos sobre espectroscopia por refletância difusa

A distribuição da intensidade da radiação eletromagnética em função da frequência ou comprimento de onda é denominada espectro eletromagnético. O espectro eletromagnético é dividido em regiões ou bandas que estão relacionadas com a maneira a partir da qual ocorre a produção ou detecção das radiações (Figura 6).

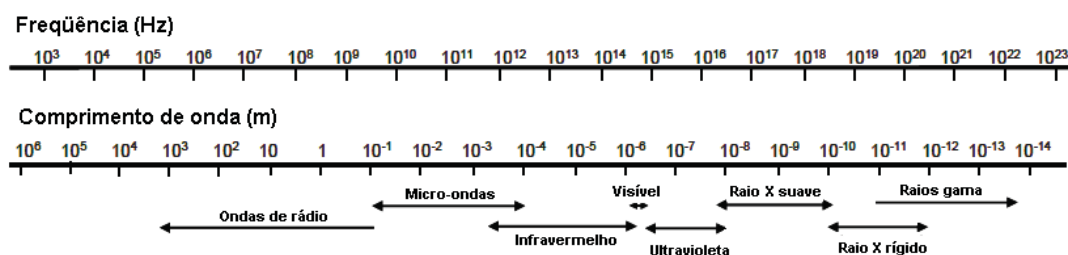


Figura 6 – O espectro eletromagnético (Adaptado de VISCARRA ROSSEL et al. 2006).

O conjunto de técnicas para levantamento de dados físico-químicos de uma amostra através da transmissão, absorção ou reflexão da energia radiante incidente é denominado espectroscopia. Várias regiões do espectro eletromagnético são utilizadas na análise da

composição de materiais. Em alguns casos, a radiação atravessa o material sendo analisado e as frequências absorvidas estão relacionadas com a composição do material. Em outros casos, a radiação é refletida ou refratada pela amostra do material e a informação sobre sua composição está relacionada com o resultado de mudanças ocorridas na radiação após a reflexão ou refração (CONKLIN, 2005).

A espectroscopia por refletância levanta dados físico-químicos de um determinado material a partir do fluxo de radiação eletromagnética refletida por ele. Para superfícies não totalmente planas, ocorre o fenômeno da reflexão difusa, onde a radiação incidente penetra na amostra, interage com as partículas em seu interior, sofre uma absorção parcial devido ao espalhamento e retorna à superfície ou a um dispositivo sensor (FERRARINI, 2004).

Na reflexão difusa ocorre a atenuação da energia radiante incidente, uma vez que a mesma entra em contato diversas vezes com as partículas da amostra, o que acaba fornecendo muitas informações analíticas sobre a mesma (Figura 7).

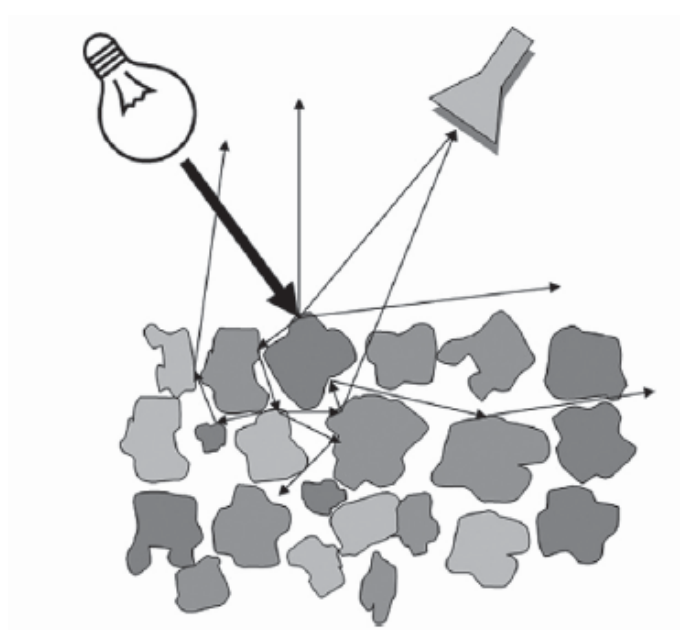


Figura 7 – Reflexão difusa (STENBERG et al. 2010).

Segundo Dalmolin et al. (2005), a quantidade de energia radiante refletida depende de três fatores: a quantidade de energia radiante incidente, que pode ser proveniente de uma lâmpada, por exemplo; a quantidade de energia radiante absorvida e a quantidade de energia radiante transmitida por espalhamento. Matematicamente, para um determinado comprimento de onda λ , temos:

$$R(\lambda) = I(\lambda) - (A(\lambda) + T(\lambda)) \quad (1)$$

Onde R é a refletância (energia radiante refletida), I é a energia radiante incidente, A é a absorvância (energia radiante absorvida) e T é a transmitância (energia radiante transmitida por espalhamento).

A variação da refletância de uma amostra em função do comprimento de onda da radiação incidente é denominada assinatura espectral e depende das propriedades da amostra.

Uma prática comum em espectroscopia por refletância difusa é trabalhar com medidas de absorvância, uma vez que essa propriedade tende a ser proporcional à concentração da substância absorvente (STENBERG et al. 2010). A relação entre absorvância e refletância é dada por:

$$A = \log\left(\frac{1}{R}\right) \quad (2)$$

2.2.2 Aplicações da espectroscopia VIS-NIR na análise de solo

Segundo Adamchuk et al. (2004), a medida das características de refletância de um determinado material constitui-se em uma técnica rápida e não-destrutiva para avaliar suas propriedades. Uma combinação de propriedades de uma amostra de solo afeta a refletância de forma específica em porções diferentes do espectro eletromagnético.

A espectroscopia por refletância difusa é uma técnica promissora para análise rápida das propriedades físicas e químicas do solo (LEE et al., 2008). Utilizando essa técnica de espectroscopia, pesquisadores têm estimado propriedades físico-químicas do solo utilizando as radiações VIS (*visible* – 400 a 700 nm) e NIR (*near infra red* – 700 a 2500 nm).

A utilização da radiação VIS-NIR tem um potencial significativo na determinação dos teores de carbono e nitrogênio. Isso faz sentido, uma vez que essas substâncias estão relacionadas com a matéria orgânica, a qual é um dos constituintes fundamentais do solo e possui reconhecidamente uma boa absorção para a radiação citada. Absorções na região NIR estão associadas também com o teor de umidade do solo. Outras propriedades como, por exemplo, nível de acidez, teor de fósforo e teor de potássio podem ser associadas mais fracamente com a absorção na faixa VIS-NIR (STENBERG et al. 2010).

Chang et al. (2001) correlacionaram os teores de carbono total, nitrogênio total e umidade do solo com refletâncias na faixa NIR do espectro. O coeficiente de determinação

(R^2) obtido para carbono total foi 0,87. Para nitrogênio total e umidade, os valores de R^2 obtidos foram 0,85 e 0,84, respectivamente. Kaleita et al. (2005) utilizaram espectroscopia nas faixas VIS e NIR para estimar o teor de umidade do solo, com os valores de R^2 variando entre 0,30 e 0,71. Song e He (2005) correlacionaram a quantidade de matéria orgânica no solo com refletâncias na faixa VIS do espectro ($R^2 = 0,8848$). Ben-Dor et al. (2008), a partir da espectroscopia nas faixas VIS e NIR, estimaram a quantidade de matéria orgânica (com os valores de R^2 variando entre 0,92 e 0,94) e teor de umidade do solo (com os valores de R^2 variando entre 0,90 e 0,98). A detecção de solos contaminados por arsênio foi feita por Zhou e Zheng (2009) utilizando as refletâncias nas regiões VIS e NIR (com os valores de R^2 variando entre 0,0175 e 0,4602). Viscarra Rossel (2009) propôs a criação de um banco de dados global de refletâncias como uma forma de popularizar a adoção da técnica da espectroscopia e torná-la ferramenta de referência internacional para utilização em análise, monitoramento e mapeamento dos solos.

Shibusawa (2003) desenvolveu um sensor RTSS movido por trator e baseado num espectrofotômetro que, através de um conjunto de 256 fotodiodos, analisa comprimentos de onda refletidos no espectro VIS e, através de outro conjunto de 128 fotodiodos, analisa comprimentos de onda refletidos no espectro NIR. O elemento fundamental do sensor RTSS é uma unidade sensora (Figura 8) que trabalha enterrada no solo em profundidades na faixa de 150 a 400 mm, coletando a energia radiante refletida. O penetrador trabalha em conjunto com o nivelador garantindo cortes de solo uniformes e planos. Um conjunto de fibras ópticas coleta a refletância do solo nas faixas de comprimento de onda de 400 a 900 nm e 900 a 2400 nm. Outro conjunto de fibras ópticas, trabalhando na faixa de 400 a 2400 nm, permite iluminação incidente em uma área de 50 mm de diâmetro na superfície do solo a partir de uma lâmpada halógena de 150 W. Uma câmera digital fotografa cada amostra de solo que será analisada. Um equipamento GPS acoplado ao sensor permite o georreferenciamento das amostras coletadas. O sensor foi utilizado para estimar, dentre outras propriedades do solo, os níveis de matéria orgânica ($R^2 = 0,647$), pH ($R^2 = 0,541$), umidade ($R^2 = 0,655$) e nitrato ($R^2 = 0,539$).

O sensor RTSS desenvolvido por Shibusawa (2003) foi também utilizado por Sakuma (2007) na estimação dos teores de nitrogênio total ($R^2 = 0,5685$) e umidade ($R^2 = 0,8927$) do solo.

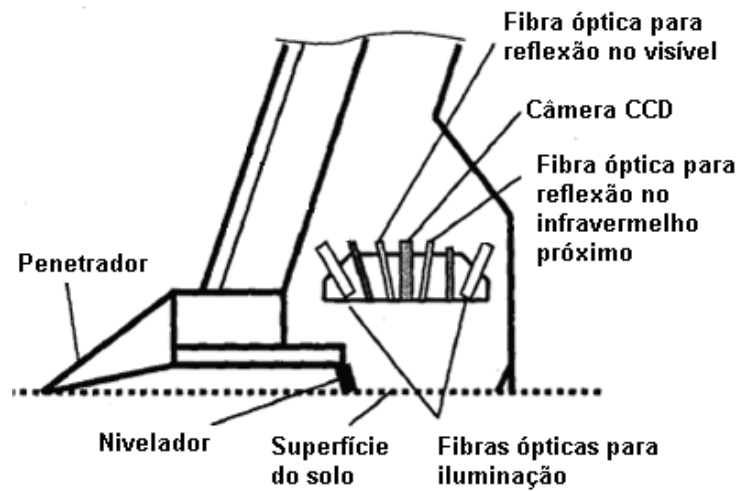


Figura 8 – Unidade sensora do sensor RTSS (Adaptado de SHIBUSAWA, 2003).

Christy (2008) também desenvolveu um sensor RTSS acoplado a um trator (Figura 9). A unidade sensora trabalha a uma profundidade de 7 cm e coleta informações georreferenciadas de refletância na faixa NIR do espectro. Os elementos principais do sensor RTSS estão indicados por números na Figura 9 e são os seguintes:

- 1) Janela de safira para transmissão dos comprimentos de onda na faixa NIR;
- 2) Lâmpada halógena, para gerar a iluminação incidente;
- 3) Coletor óptico, para direcionar a luz refletida para a fibra óptica NIR;
- 4) Fibra óptica NIR, para conduzir a luz refletida ao espectrofotômetro;
- 5) Espectrofotômetro, para análise dos comprimentos de onda refletidos;
- 6) Fonte de alimentação.

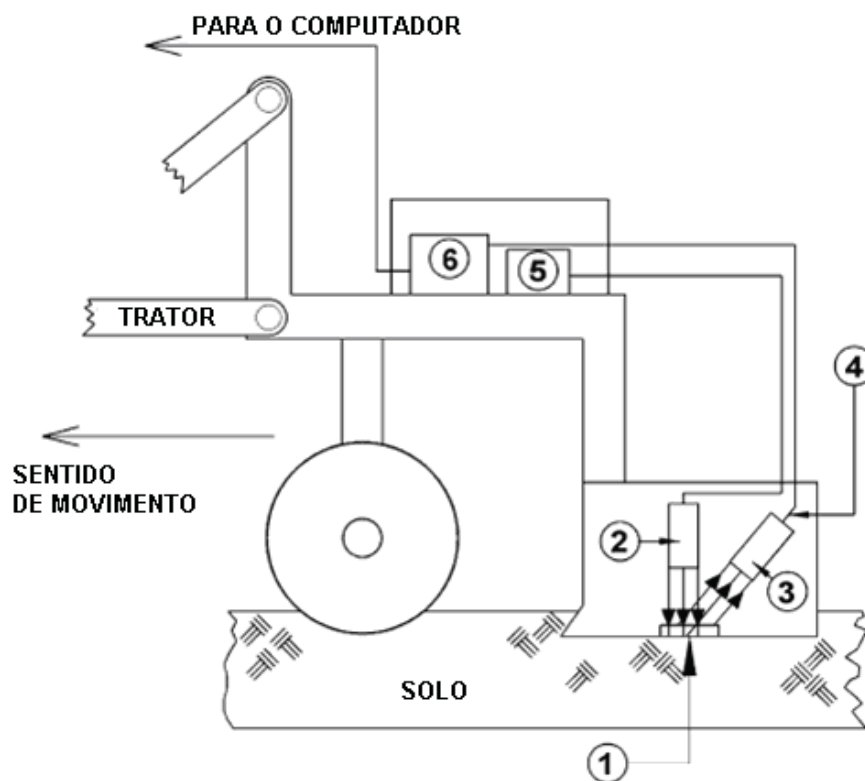


Figura 9 – Sensor RTSS acoplado a um trator (Adaptado de CHRISTY, 2008).

O sensor RTSS foi utilizado para estimar, dentre outras propriedades do solo, a quantidade de matéria orgânica (com os valores de R^2 variando entre 0,67 e 0,80), o teor de umidade (com os valores de R^2 variando entre 0,40 e 0,65) e o pH (com os valores de R^2 variando entre 0,46 e 0,62).

2.2.3 Abordagem quimiométrica

A espectroscopia por refletância difusa nos espectros VIS e NIR é amplamente não-específica devido à sobreposição das bandas de absorção dos elementos constituintes do solo e também devido ao efeito de espalhamento da luz causado pela estrutura do solo. Esses fatores geram padrões complexos de absorção que necessitam ser extraídos matematicamente do espectro e correlacionados com as propriedades do solo (STENBERG et al., 2010).

Essa análise quantitativa utiliza técnicas estatísticas de calibração multivariada, uma vez que toda a informação espectral deve ser utilizada (PANSU; GAUTHEYROU, 2006). A abordagem matemática e estatística de dados de origem química para correlacionar

parâmetros de qualidade e propriedades físicas é conhecida como quimiometria (FERREIRA et al., 1999).

Em quimiometria, o conceito de calibração está relacionado com todo procedimento utilizado para encontrar um algoritmo matemático que obtenha as propriedades de interesse a partir de sinais instrumentais (Figura 10).

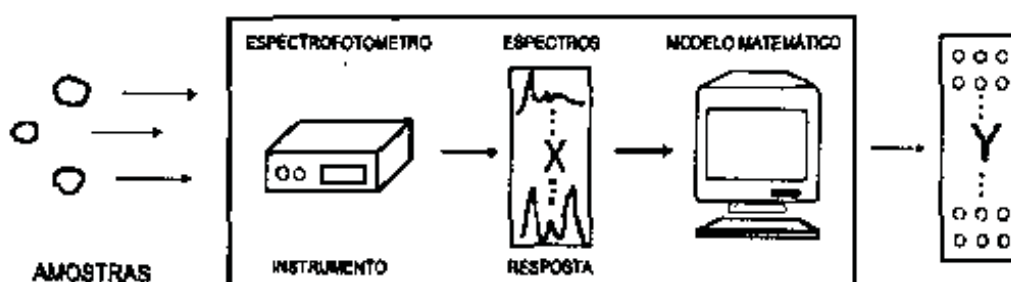


Figura 10 – Calibração multivariada em espectroscopia (FERREIRA et al., 1999).

Segundo Stenberg et al. (2010), o procedimento para estabelecer o algoritmo matemático citado envolve inicialmente uma fase de pré-tratamento dos dados espectrais para correção de não-linearidades, variações nas amostras e ruídos. Para reduzir ruídos nos sinais espectrais das amostras, são utilizados os chamados filtros de suavização (*smoothing*), sendo os mais populares os filtros de média móvel, mediana e de Savitsky-Golay (SAVITSKY; GOLAY, 1964).

Outra técnica amplamente utilizada na fase de pré-tratamento dos dados obtidos por espectroscopia é a análise derivativa. A utilização de métodos derivativos tende a acentuar pequenas diferenças estruturais entre espectros aparentemente idênticos, além de realizar a correção de *background*, caracterizada pela supressão de picos de absorção de radiação por outros elementos do meio que são irrelevantes para a amostra sob análise. A aplicação de métodos derivativos tende a amplificar ruídos, então os filtros de suavização são frequentemente utilizados em conjunto com essa técnica (O'HARE, 2008; STENBERG et al., 2010).

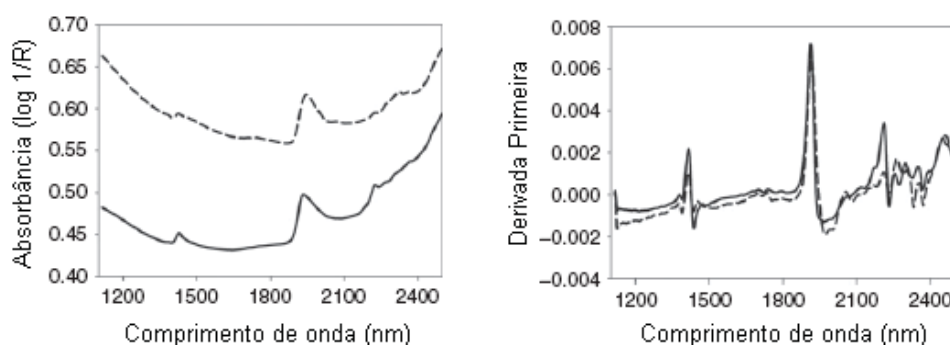


Figura 11 – Efeito da análise derivativa no espectro de absorvâncias de duas amostras (Adaptado de STENBERG et al., 2010).

Após a fase de pré-tratamento dos dados espectrais, torna-se necessário encontrar o modelo de calibração multivariada mais adequado. A regressão por mínimos quadrados parciais (PLS – *partial least squares*) é uma técnica de modelamento bastante popular utilizada em quimiometria. Ela tornou-se uma ferramenta padrão para modelagem de relações lineares entre medições multivariadas (MORELLATO, 2010).

A regressão PLS faz combinações lineares entre os elementos do conjunto de dados espectrais e os elementos do conjunto de valores de alguma propriedade específica (referência) a ser estimada para encontrar a correlação entre ambos, utilizando para isso uma quantidade de variáveis latentes. O modelo de calibração é construído utilizando o número de variáveis latentes que geram o menor erro de previsão, ou seja, as menores diferenças entre os valores de referência e os valores previstos pelo modelo. Para validação do modelo, geralmente utiliza-se o método de validação cruzada, onde um conjunto de amostras da série de calibração é retirado, sendo feita a previsão do valor da propriedade referente a esse conjunto de amostras pelo modelo. Esse processo é repetido até que todas as amostras tenham sido retiradas da série de calibração. O erro de previsão cumulativo é utilizado para avaliar a precisão da estimativa (FERRARINI, 2004). Informações mais detalhadas sobre a regressão PLS podem ser encontradas em Geladi e Kowalski (1986).

Os *softwares* UNSCRAMBLER, NSAS, ISI e IDAS são exemplos de ferramentas computacionais comerciais para a análise quimiométrica (LIMA et al, 2008).

O UNSCRAMBLER (*CAMO Process AS*) é um *software* de análise quimiométrica bastante popular que tem como *slogan* a utilização de interfaces que facilitam a construção de modelos de calibração multivariada, permitindo uma interpretação rápida e simples dos

resultados pelo usuário. As figuras seguintes ilustram algumas interfaces do UNSCRAMBLER.

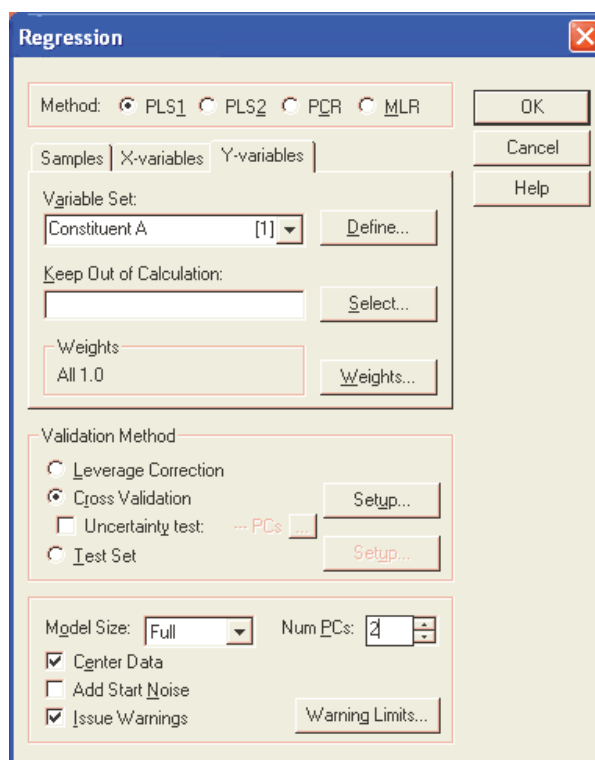


Figura 12 – Configuração de regressão PLS no UNSCRAMBLER (CAMO PROCESS AS, 2006).

2.3 Sistemas Inteligentes Baseados em Redes Neurais Artificiais

Esta seção apresenta conceitos sobre sistemas inteligentes baseados em redes neurais artificiais e suas aplicações na agricultura.

De maneira geral, o termo Sistemas Inteligentes refere-se a sistemas que possuem a capacidade de incorporar aspectos comumente associados ao comportamento inteligente do ser humano, tais como percepção, raciocínio, aprendizagem, evolução e adaptação.

Podem ser apontadas como características-chave dos Sistemas Inteligentes a habilidade para utilização do conhecimento na execução de tarefas e resolução de problemas e a utilização de regras de associação e inferência para lidar com problemas complexos semelhantes aos encontrados no mundo real. Como exemplos de técnicas utilizadas pelos Sistemas Inteligentes, temos Aquisição de Conhecimento, Aprendizado de Máquina, Redes Neurais Artificiais, Lógica *Fuzzy*, Computação Evolutiva, Agentes e Multiagentes, Mineração de Dados e de Textos (REZENDE, 2003).

Uma rede neural artificial é um conjunto de elementos processadores (neurônios) interligados por um grande número de conexões (sinapses), os quais são capazes de aprender (ajuste de pesos), armazenar conhecimentos e se adaptar a novas situações. A capacidade de aprender através de exemplos (padrões), e de generalizar (fornecer respostas adequadas para dados que não estão no conjunto de exemplos) é o principal atrativo das redes neurais artificiais (BRAGA et al., 2000; HAYKIN, 2001). Uma rede neural possibilita com isso, solucionar problemas complexos sem a necessidade de definições explícitas entre dados de entradas e saídas.

Segundo Haykin (1999), uma propriedade fundamental das redes neurais artificiais é a habilidade de extrair informação de um determinado ambiente e melhorar seu desempenho através do aprendizado. O processo de aprendizagem das redes neurais artificiais ocorre a partir dos seguintes passos:

- A rede neural artificial é estimulada por um determinado ambiente;
- A rede neural artificial sofre mudanças em seus parâmetros devido ao estímulo;
- A rede neural artificial responde de uma nova maneira ao estímulo devido às alterações ocorridas em sua estrutura interna.

Como exemplos de aplicação para redes neurais podem ser citados sistemas de controle, o reconhecimento de padrões e a aproximação universal de funções (ANTSAKLIS, 1992; NARENDRA; PARTHASARATHY, 1990).

As redes neurais vêm sendo utilizadas com sucesso em aplicações relacionadas com a agricultura. Baidyk et al. (2010) propuseram um classificador neural para sistemas de visão autônomos com o intuito de identificar lagartas em lavouras. Nagaoka et al. (2005) utilizaram redes neurais na otimização da classificação de tipos de solo. Pinto et al. (2002) apresentaram a utilização de redes neurais como método alternativo para descrição da ferrugem do cafeeiro. Sena Júnior et al. (2001) desenvolveram um algoritmo para classificação de plantas de milho atacadas pela lagarta do cartucho em imagens digitais baseado em redes neurais. Noh et al. (2006) utilizou redes neurais como ferramenta para estimar em tempo real a quantidade de nitrogênio em plantas de milho a partir de radiações R (*red*), G (*green*) e NIR refletidas pelas folhas e captadas por sensores de imagem.

Redes neurais artificiais dos tipos *Perceptron* Multicamadas (PMC) e Função Base Radial (RBF - *radial basis function*) são exemplos de redes utilizadas nas tarefas de reconhecimento de padrões e aproximação de funções citadas anteriormente. Estes dois tipos foram escolhidos no presente trabalho para o mapeamento entre refletâncias e propriedades do solo, uma vez que a relação entre as refletâncias e uma propriedade específica não é explícita e tende a ser não linear.

O Apêndice C apresenta informações mais detalhadas sobre as redes neurais artificiais utilizadas neste trabalho.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Este capítulo descreverá os materiais utilizados para a implementação dos sistemas inteligentes baseados em redes neurais artificiais, além da metodologia utilizada para processamento dos dados de entrada e avaliação do desempenho dos sistemas com relação ao objetivo deste trabalho.

3.1 Equipamentos

Os equipamentos utilizados durante o desenvolvimento deste trabalho foram:

- ✓ Computador *Intel Core 2 Duo E4500 2,2 GHz* com 2 GB de memória RAM e sistema operacional *Windows XP*, para processamento de dados;
- ✓ Fonte de alimentação;
- ✓ Cabos para interligação.

3.2 Ferramentas Computacionais

Para a implementação e teste dos sistemas inteligentes foi utilizado o *software* MATLAB 7.0 (*The Mathworks, Inc.*).

3.3 Base de Dados

A base de dados utilizada neste trabalho foi gentilmente cedida pelo Professor Doutor Sakae Shibusawa.

A base de dados consiste em informações de refletância do solo obtidas através do sensor RTSS desenvolvido por Shibusawa (2003), que foi descrito no item 2.2.2 e que segue mostrado na Figura 15.

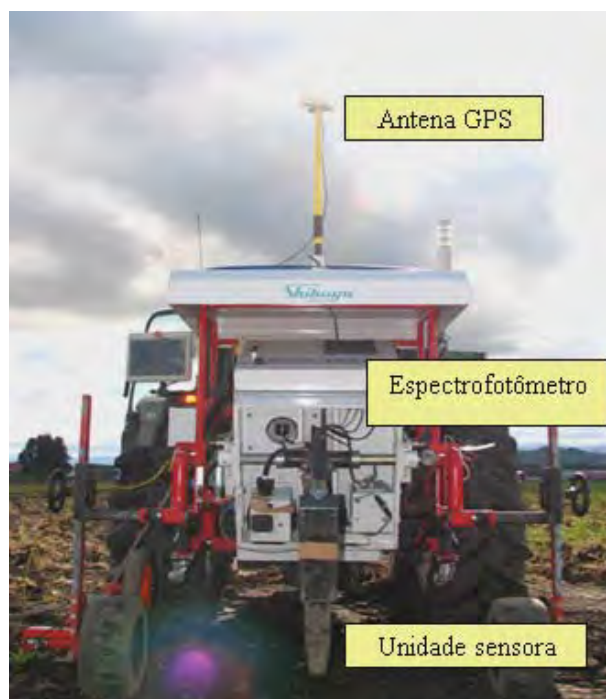


Figura 15 – Sensor RTSS utilizado para levantamento da base de dados (Adaptado de SAKUMA, 2007).

O sensor RTSS foi utilizado por Sakuma (2007) para determinação dos teores de nitrogênio total e umidade do solo em uma área para plantação de trigo com 115,3 metros de comprimento e 33,6 metros de largura utilizada pelo instituto *Gunma Agricultural Technology Center* para pesquisa agrícola experimental no Japão.

Em outubro de 2005, antes do plantio do trigo e sem aplicação de nitrogênio no solo, o sensor RTSS coletou dados em 5 linhas longitudinais com espaçamento de 5 metros entre si. A cada 1 metro, a refletância do solo foi amostrada com a unidade sensora a uma profundidade de 200 mm, totalizando 574 amostras de refletância analisadas pelo espectrofotômetro. Para análise em laboratório, amostras de solo foram retiradas a cada 5 metros na mesma linha que era percorrida pelo sensor, totalizando 115 amostras.

Houve aplicação de nitrogênio no solo (taxa uniforme de 1,5 kg/ha) após a coleta de dados realizada em 2005. O solo da área de coleta é do tipo Andisol (61,2% de areia, 28% de silte e 10,8% de argila).

Em junho de 2006, após o plantio e colheita do trigo, o sensor RTSS coletou dados em 9 linhas a uma profundidade de 200 mm, amostrando a refletância a cada 1 metro, totalizando 1724 amostras de refletância. Para análise em laboratório, amostras de solo foram retiradas a cada 5 metros na mesma linha que era percorrida pelo sensor, totalizando 183 amostras.

Todas as amostras coletadas em 2005 e 2006 foram georreferenciadas por GPS.

Para a montagem da base de dados, foram consideradas:

- 115 amostras de solo, referenciadas por GPS, em cinco linhas e analisadas em laboratório (2005);
- 183 amostras de solo, referenciadas por GPS, em nove linhas e analisadas em laboratório (2006).

Considerando os dois anos, tem-se um total de 298 amostras de solo.

Os dados estão organizados em duas planilhas (arquivo *xls*), uma contendo informações sobre o ano de 2005 e a outra sobre o ano de 2006. Cada amostra de solo está relacionada com 224 leituras de refletância nos comprimentos de onda no intervalo de 305 a 1695 nm, com largura de banda espectral aproximada de 5,7 nm. A planilha apresenta as informações de refletância convertidas em unidades de absorbância. Cada amostra de solo também está relacionada com os teores de nitrogênio total e umidade medidos em laboratório. As unidades utilizadas são mg/100g para nitrogênio total e % para umidade.

Mais detalhes sobre a organização da base de dados nas planilhas podem ser encontrados no Apêndice A.

3.4 Metodologia

Esta seção apresenta a metodologia e os índices de desempenho utilizados na estimação dos teores de nitrogênio total e umidade utilizando a base de dados obtida via espectroscopia e as redes neurais dos tipos PMC e RBF.

Foram utilizados quatro métodos, apresentados de forma resumida abaixo.

- ✓ Método 1: Treinamento com única interrupção sem tratamento derivativo

O treinamento da rede neural é interrompido quando o erro de treinamento for inferior a um determinado valor objetivo. A rede neural é validada uma vez após o treinamento. Não é utilizado tratamento derivativo no espectro de absorbâncias.

✓ Método 2: Treinamento com única interrupção e tratamento derivativo

O treinamento da rede neural é interrompido quando o erro de treinamento for inferior a um determinado valor objetivo. A rede neural é validada uma vez após o treinamento. É utilizado tratamento derivativo no espectro de absorbâncias.

✓ Método 3: Treinamento com várias interrupções sem tratamento derivativo

O treinamento da rede neural é interrompido toda vez que um determinado intervalo de épocas for atingido. A rede neural é validada após cada interrupção do treinamento. O processo continua até que um número máximo de épocas seja atingido. Não é utilizado tratamento derivativo no espectro de absorbâncias.

✓ Método 4: Treinamento com várias interrupções e tratamento derivativo

O treinamento da rede neural é interrompido toda vez que um determinado intervalo de épocas for atingido. A rede neural é validada após cada interrupção do treinamento. O processo continua até que um número máximo de épocas seja atingido. É utilizado tratamento derivativo no espectro de absorbâncias.

Informações mais detalhadas sobre cada método são apresentadas a seguir.

3.4.1 Método 1 – Treinamento com única interrupção sem tratamento derivativo

O Método 1 é composto pelos seguintes passos:

- 1) Escolha da propriedade de solo que será estimada pela rede neural: nitrogênio total ou umidade;
- 2) Escolha do tipo de rede neural que será utilizada: PMC ou RBF;
- 3) Determinação do erro máximo de treinamento;

4) Para a rede PMC, escolha do número de camadas escondidas e do número de neurônios por camada escondida. Para a camada de saída, foi assumido sempre um neurônio, que corresponde à propriedade que está sendo estimada. Para a rede RBF, escolha do valor para a variância da função de base radial;

5) Leitura de todas as amostras de absorvância da planilha (anos 2005 e 2006) totalizando 298 amostras com absorvâncias em 224 comprimentos de onda;

6) Exibição de gráfico de absorvância *versus* comprimento de onda;

7) Descarte das absorvâncias nos comprimentos de onda nas extremidades do espectro, utilizando como faixa útil o intervalo de 500 a 1650 nm;

8) Aplicação de filtro de suavização (*smoothing*) nas amostras de absorvância utilizando o método de Savitsky-Golay de terceira ordem e reconsiderar como faixa útil do espectro o intervalo de 625 a 1585 nm;

9) Exibição de gráficos de absorvância *versus* comprimento de onda para os espectros obtidos nos passos 7 e 8;

10) Normalização das absorvâncias no intervalo $[-1, +1]$;

11) Geração de 298 inteiros aleatórios no intervalo $[1, 298]$ para serem utilizados como índices de busca no conjunto de absorvâncias (sorteio de índices);

12) Utilização dos índices de busca sorteados no passo 11 para separação de 80% das amostras de absorvância para treinamento (238 amostras) e 20% restantes (60 amostras) para validação da rede neural;

13) Leitura de todas as amostras dos valores de nitrogênio total ou umidade;

14) Normalização dos valores de nitrogênio total ou umidade no intervalo $[-1, +1]$;

15) Utilização dos mesmos índices de busca sorteados no passo 11 para separação de 80% das amostras de nitrogênio total ou umidade para treinamento (238 amostras) e 20% restantes (60 amostras) para validação da rede neural;

16) Criação da rede neural PMC ou RBF. As entradas da rede são os valores de absorbância e a saída é o valor estimado do nitrogênio total ou umidade. Para a rede PMC, nas camadas escondidas, foi assumida função de ativação tangente hiperbólica sigmoidal e, na camada de saída, foi assumida função de ativação linear saturada (rampa). Para o treinamento da rede PMC foi utilizado o algoritmo de Levenberg-Marquardt;

17) Treinamento da rede neural com o conjunto de treinamento;

18) Registro do número de épocas do treinamento;

19) Simulação da rede neural com o conjunto de treinamento;

20) Simulação da rede neural com o conjunto de validação;

21) Exibição de gráficos para verificação do desempenho do treinamento e da validação;

22) Cálculo dos valores dos coeficientes de determinação (R^2) obtidos no treinamento e na validação;

23) Cálculo do valor da raiz do erro quadrático médio (RMSE) obtido na validação;

24) Realizar cinco repetições dos passos 5 a 23 para a configuração de rede neural escolhida nos passos 2, 3 e 4;

25) Cálculo do coeficiente de determinação médio e da variância (validação) obtidos nas cinco repetições.

26) Comparação dos indicadores coeficiente de determinação máximo na validação da rede neural e a correspondente raiz do erro quadrático médio com os indicadores obtidos

por Sakuma (2007) que, para calibração e validação das amostras de solo, utilizou como ferramenta computacional a regressão PLS via *software* UNSCRAMBLER.

Os passos 1 a 23 foram implementados através de um programa escrito em linguagem M do *software* MATLAB. O código fonte segue no Apêndice B.

3.4.2 Método 2 – Treinamento com única interrupção e tratamento derivativo

O Método 2 é composto pelos seguintes passos:

1) Escolha da configuração de rede neural (PMC e RBF) com maior coeficiente de determinação (R^2) médio de validação obtido no Método 1;

2) Leitura de todas as amostras de absorvância da planilha (anos 2005 e 2006) totalizando 298 amostras com absorvâncias em 224 comprimentos de onda;

3) Exibição de gráfico de absorvância *versus* comprimento de onda;

4) Descarte das absorvâncias nos comprimentos de onda nas extremidades do espectro, utilizando como faixa útil o intervalo de 500 a 1650 nm;

5) Aplicação de filtro de suavização (*smoothing*) nas amostras de absorvância utilizando o método de Savitsky-Golay de terceira ordem e reconsiderar como faixa útil do espectro o intervalo de 625 a 1585 nm;

6) Exibição de gráficos de absorvância *versus* comprimento de onda para os espectros obtidos nos passos 4 e 5;

7) Cálculo da derivada primeira no conjunto de absorvâncias obtido no passo 5;

8) Cálculo da derivada segunda no conjunto de absorvâncias obtido no passo 5;

9) Exibição de gráfico de absorvância *versus* comprimento de onda das absorvâncias obtidas no passo 8;

- 10) Normalização das absorbâncias obtidas no passo 8 no intervalo $[-1, +1]$;
- 11) Exibição de gráfico de absorbância *versus* comprimento de onda das absorbâncias normalizadas;
- 12) Geração de 298 inteiros aleatórios no intervalo $[1, 298]$ para serem utilizados como índices de busca no conjunto de absorbâncias (sorteio de índices);
- 13) Utilização dos índices de busca sorteados no passo 11 para separação de 80% das amostras de absorbância para treinamento (238 amostras) e 20% restantes (60 amostras) para validação;
- 14) Exibição de gráfico de absorbância *versus* comprimento de onda dos conjuntos de treinamento e validação;
- 15) Leitura de todas as amostras dos valores de nitrogênio total ou umidade;
- 16) Normalização dos valores de nitrogênio total ou umidade no intervalo $[-1, +1]$;
- 17) Utilização dos mesmos índices de busca sorteados no passo 11 para separação de 80% das amostras de nitrogênio total ou umidade para treinamento (238 amostras) e 20% restantes (60 amostras) para validação;
- 18) Treinamento da rede neural com o conjunto de treinamento. Para a rede PMC, o algoritmo de treinamento utilizado é o de Levenberg-Marquardt;
- 19) Registro do número de épocas do treinamento;
- 20) Simulação da rede neural com o conjunto de treinamento;
- 21) Simulação da rede neural com o conjunto de validação;
- 22) Exibição de gráficos para verificação do desempenho do treinamento e da validação;

23) Cálculo dos valores dos coeficientes de determinação obtidos no treinamento e na validação;

24) Cálculo do valor da raiz do erro quadrático médio (RMSE) obtido na validação;

25) Realizar cinco repetições dos passos 2 a 24 para a configuração de rede neural escolhida no passo 1;

26) Cálculo do coeficiente de determinação médio e da variância (validação) obtidos nas cinco repetições.

27) Comparação dos indicadores coeficiente de determinação máximo na validação da rede neural e a correspondente raiz do erro quadrático médio com os indicadores obtidos por Sakuma (2007) que, para calibração e validação das amostras de solo, utilizou como ferramenta computacional a regressão PLS via *software* UNSCRAMBLER.

Os passos 1 a 24 foram implementados através de um programa escrito em linguagem M do *software* MATLAB. O código fonte segue no Apêndice B.

3.4.3 Método 3 – Treinamento com várias interrupções sem tratamento derivativo

O Método 3 é composto pelos seguintes passos:

1) Escolha da propriedade de solo que será estimada pela rede neural: nitrogênio total ou umidade;

2) Escolha do tipo de rede neural que será utilizada: PMC ou RBF;

3) Para a rede PMC, escolha do número de camadas escondidas e do número de neurônios por camada escondida. Para a camada de saída, foi assumido sempre um neurônio, que corresponde à propriedade que está sendo estimada. Para a rede RBF, escolha do valor para a variância da função de base radial. O número máximo inicial de neurônios permitidos na camada escondida da rede RBF é 5;

4) Leitura de todas as amostras de absorvância da planilha (anos 2005 e 2006) totalizando 298 amostras com absorvâncias em 224 comprimentos de onda;

5) Exibição de gráfico de absorvância *versus* comprimento de onda;

6) Descarte das absorvâncias nos comprimentos de onda nas extremidades do espectro, utilizando como faixa útil o intervalo de 500 a 1650 nm;

7) Aplicação de filtro de suavização (*smoothing*) nas amostras de absorvância utilizando o método de Savitsky-Golay de terceira ordem e reconsiderar como faixa útil do espectro o intervalo de 625 a 1585 nm;

8) Exibição de gráficos de absorvância *versus* comprimento de onda para os espectros obtidos nos passos 6 e 7;

9) Normalização das absorvâncias no intervalo [-1, +1];

10) Geração de 298 inteiros aleatórios no intervalo [1, 298] para serem utilizados como índices de busca no conjunto de absorvâncias (sorteio de índices);

11) Utilização dos índices de busca sorteados no passo 7 para separação de 80% das amostras de absorvância para treinamento (238 amostras) e 20% restantes (60 amostras) para validação da rede neural;

12) Leitura de todas as amostras dos valores de nitrogênio total ou umidade;

13) Normalização dos valores de nitrogênio total ou umidade no intervalo [-1, +1];

14) Utilização dos mesmos índices de busca sorteados no passo 7 para separação de 80% das amostras de nitrogênio total ou umidade para treinamento (238 amostras) e 20% restantes (60 amostras) para validação da rede neural;

15) Treinamento da rede neural com o conjunto de treinamento;

16) Simulação da rede neural com o conjunto de validação a cada 5 épocas de treinamento para a rede PMC. Para a rede RBF, a simulação com o conjunto de validação ocorre após o término do treinamento quando o número máximo de neurônios permitido na camada escondida for atingido;

17) Cálculo do coeficiente de determinação (R^2) e da raiz do erro quadrático médio (RMSE) após a simulação com o conjunto de validação;

18) Repetição dos passos 15, 16 e 17 até que seja atingido o número máximo de 100 épocas de treinamento para a rede PMC ou o número máximo de 235 neurônios na camada escondida para a rede RBF. Antes de cada repetição, para a rede RBF, são acrescentados 5 neurônios ao número máximo de neurônios permitidos na camada escondida para novo treinamento;

19) Escolha da rede neural com conjuntos de pesos e limiares de ativação com melhor desempenho de validação, utilizando como critério o valor máximo do coeficiente de determinação obtido após a repetição prevista no passo 18;

20) Simulação da rede neural escolhida com o conjunto de treinamento;

21) Simulação da rede neural escolhida com o conjunto de validação;

22) Exibição de gráficos para verificação do desempenho do treinamento e da validação;

23) Cálculo do valor do coeficiente de determinação obtido no treinamento;

24) Realizar cinco repetições dos passos 4 a 23 para a configuração de rede neural escolhida nos passos 2 e 3;

25) Cálculo do coeficiente de determinação médio e da variância (validação) obtidos nas cinco repetições.

26) Comparação dos indicadores coeficiente de determinação máximo obtido na validação da rede neural e a correspondente raiz do erro quadrático médio com os indicadores obtidos por Sakuma (2007) que, para calibração e validação das amostras de solo, utilizou como ferramenta computacional a regressão PLS via *software* UNSCRAMBLER.

Os passos 1 a 23 foram implementados através de um programa escrito em linguagem M do *software* MATLAB. O código fonte segue no Apêndice B.

3.4.4 Método 4 – Treinamento com várias interrupções e tratamento derivativo

O Método 4 é composto pelos seguintes passos:

1) Escolha da configuração de rede neural (PMC e RBF) com maior coeficiente de determinação (R^2) médio de validação obtido no Método 3;

2) Leitura de todas as amostras de absorvância da planilha (anos 2005 e 2006) totalizando 298 amostras com absorvâncias em 224 comprimentos de onda;

3) Exibição de gráfico de absorvância *versus* comprimento de onda;

4) Descarte das absorvâncias nos comprimentos de onda nas extremidades do espectro, utilizando como faixa útil o intervalo de 500 a 1650 nm;

5) Aplicação de filtro de suavização (*smoothing*) nas amostras de absorvância utilizando o método de Savitsky-Golay de terceira ordem e reconsiderar como faixa útil do espectro o intervalo de 625 a 1585 nm;

6) Exibição de gráficos de absorvância *versus* comprimento de onda para os espectros obtidos nos passos 4 e 5;

7) Cálculo da derivada primeira no conjunto de absorvâncias obtido no passo 5;

8) Cálculo da derivada segunda no conjunto de absorvâncias obtido no passo 5;

9) Exibição de gráfico de absorvância *versus* comprimento de onda das absorvâncias obtidas no passo 8;

10) Normalização das absorvâncias obtidas no passo 8 no intervalo $[-1, +1]$;

11) Exibição de gráfico de absorvância *versus* comprimento de onda das absorvâncias normalizadas;

12) Geração de 298 inteiros aleatórios no intervalo $[1, 298]$ para serem utilizados como índices de busca no conjunto de absorvâncias (sorteio de índices);

13) Utilização dos índices de busca sorteados no passo 12 para separação de 80% das amostras de absorvância para treinamento (238 amostras) e 20% restantes (60 amostras) para validação da rede neural;

14) Leitura de todas as amostras dos valores de nitrogênio total ou umidade;

15) Normalização dos valores de nitrogênio total ou umidade no intervalo $[-1, +1]$;

16) Utilização dos mesmos índices de busca sorteados no passo 7 para separação de 80% das amostras de nitrogênio total ou umidade para treinamento (238 amostras) e 20% restantes (60 amostras) para validação da rede neural;

17) Treinamento da rede neural com o conjunto de treinamento;

18) Simulação da rede neural com o conjunto de validação a cada 5 épocas de treinamento para a rede PMC. Para a rede RBF, a simulação com o conjunto de validação ocorre após o término do treinamento quando o número máximo de neurônios permitido na camada escondida for atingido;

19) Cálculo do coeficiente de determinação e da raiz do erro quadrático médio (RMSE) após a simulação com o conjunto de validação;

20) Repetição dos passos 17, 18 e 19 até que seja atingido o número máximo de 100 épocas de treinamento para a rede PMC ou o número máximo de 235 neurônios na camada escondida para a rede RBF. Antes de cada repetição, para a rede RBF, são acrescentados 5 neurônios ao número máximo de neurônios permitidos na camada escondida para novo treinamento;

21) Escolha da rede neural com conjuntos de pesos e limiares de ativação com melhor desempenho de validação, utilizando como critério o valor máximo do coeficiente de determinação obtido após a repetição prevista no passo 20;

22) Simulação da rede neural escolhida com o conjunto de treinamento;

23) Simulação da rede neural escolhida com o conjunto de validação;

24) Exibição de gráficos para verificação do desempenho do treinamento e da validação;

25) Cálculo do valor do coeficiente de determinação obtido no treinamento;

26) Realizar cinco repetições dos passos 2 a 26 para a configuração de rede neural escolhida no passo 1;

27) Cálculo do coeficiente de determinação médio e da variância (validação) obtidos nas cinco repetições.

28) Comparação dos indicadores coeficiente de determinação máximo obtido na validação da rede neural e a correspondente raiz do erro quadrático médio com os indicadores obtidos por Sakuma (2007) que, para calibração e validação das amostras de solo, utilizou como ferramenta computacional a regressão PLS via *software* UNSCRAMBLER.

Os passos 1 a 25 foram implementados através de um programa escrito em linguagem M do *software* MATLAB. O código fonte segue no Apêndice B.

3.4.5 Índices de desempenho

Para avaliar o desempenho das redes neurais na estimação dos teores de nitrogênio total e umidade, foram utilizados alguns índices estatísticos que seguem abaixo descritos.

O coeficiente de correlação linear (R) é calculado automaticamente pelo *software* MATLAB na exibição dos gráficos para verificação de desempenho (regressão linear). O coeficiente é utilizado para verificar o grau de linearidade entre os valores estimados pela rede neural e os valores reais medidos em laboratório, sendo calculado por:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n (r_n - \bar{r})(e_n - \bar{e})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (r_n - \bar{r})^2 \sum_{i=1}^n (e_n - \bar{e})^2}} \quad (3)$$

Onde r_n refere-se ao valor real para uma determinada amostra, $\bar{r}$ refere-se à média dos valores reais das amostras, e_n refere-se ao valor estimado para uma determinada amostra, $\bar{e}$ refere-se à média dos valores estimados e n é o número de amostras.

O coeficiente de determinação é o quadrado do coeficiente de correlação linear (R^2) e avalia a qualidade do ajuste linear entre os valores estimados e os valores reais. Quanto mais próximos de 1 forem os valores dos coeficientes, melhor a qualidade do ajuste.

A raiz quadrada do erro quadrático médio (RMSE – *root mean square error*) mostra, em unidades da variável que está sob análise, a dispersão média dos valores das amostras reais e estimadas ao redor da linha de regressão linear. Quanto menor o valor do RMSE, melhor é a qualidade da previsão feita pela rede neural. O RMSE é calculado da seguinte forma:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (r_n - e_n)^2}{n}} \quad (4)$$

Onde r_n refere-se ao valor real para uma determinada amostra e e_n refere-se ao valor estimado para a mesma amostra e n é o número de amostras.

A variância (V) é utilizada para avaliar a homogeneidade de todos os coeficientes de determinação de validação obtidos após as repetições previstas na metodologia, sendo calculada da seguinte forma:

$$V = \frac{\sum_{i=1}^n (c_n - \bar{c})^2}{n - 1} \quad (5)$$

Onde c_n é o valor do coeficiente de determinação de validação para uma determinada repetição, $\bar{c}$ é o valor médio dos coeficientes de determinação de validação obtidos após as repetições e n é o número de repetições.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este capítulo apresenta resultados e discussões pertinentes relacionados com cada método previsto na metodologia, bem como análises comparativas entre eles e gráficos ilustrativos.

4.1 Pré-Tratamento do Espectro de Absorbâncias

O gráfico com o espectro de absorbâncias original, ou seja, na faixa de 305 a 1695 nm, para todas as amostras de solo e que foi gerado no MATLAB, segue abaixo. Cada curva corresponde à resposta espectral de uma amostra de solo específica.

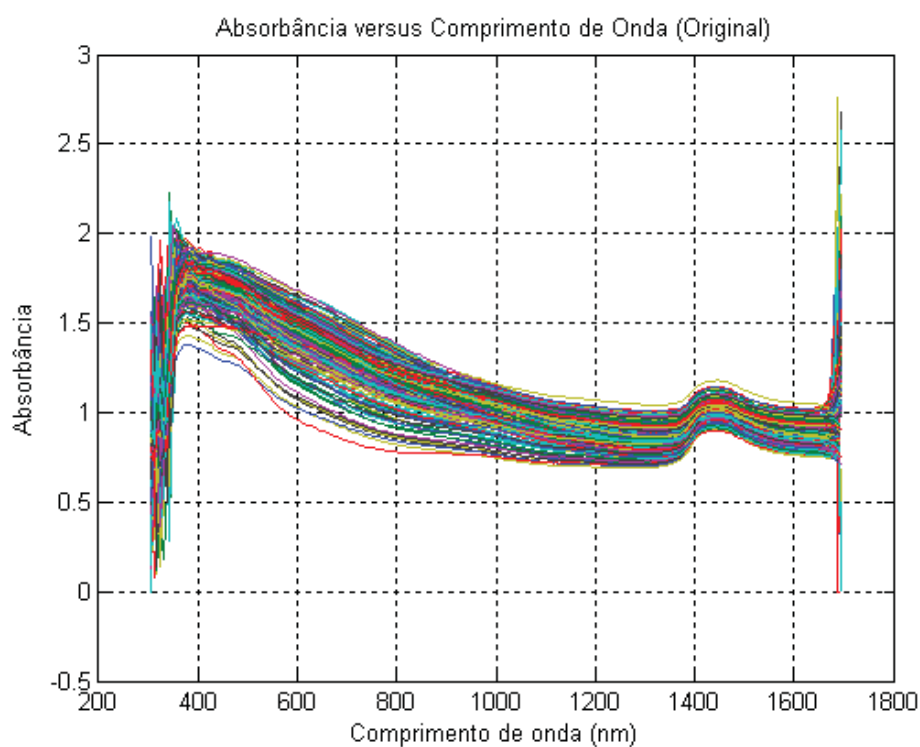


Figura 16 – Absorbância versus Comprimento de Onda (Original).

Segundo Sakuma (2007), a instabilidade do sensor RTSS na leitura das absorbâncias nas extremidades do espectro gera valores discrepantes que devem ser descartados. Após o descarte das absorbâncias nas extremidades do espectro original, o espectro resultante,

denominado útil, possui absorbâncias nos comprimentos de onda na faixa de 500 a 1650 nm. O gráfico do espectro útil, gerado no MATLAB, vem a seguir.

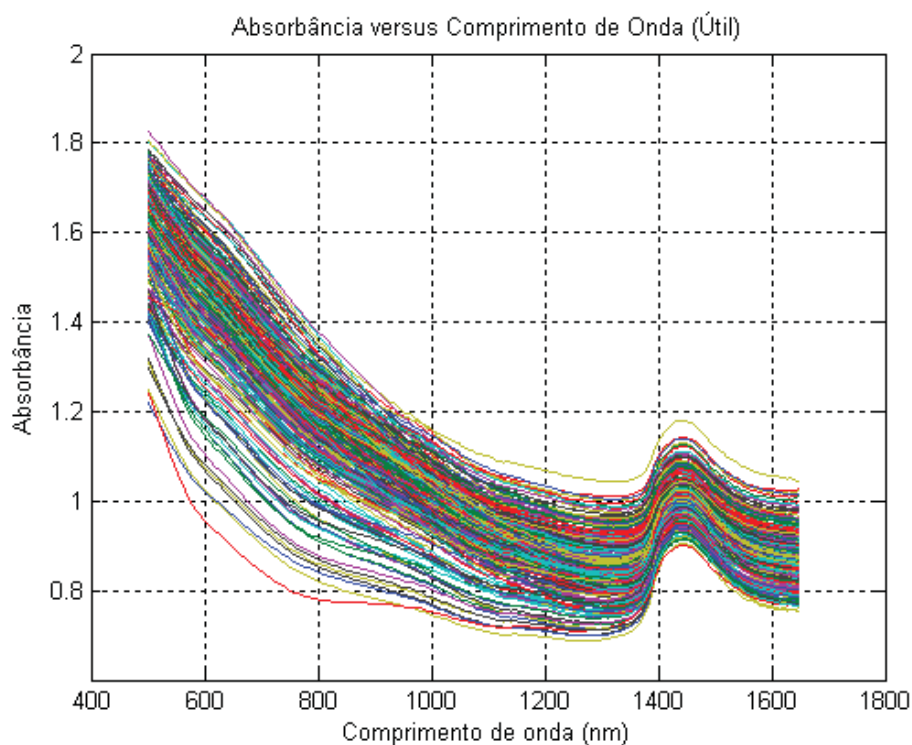


Figura 17 – Absorbância versus Comprimento de Onda (Útil).

Seguindo o procedimento adotado por Sakuma (2007), foi aplicado filtro de *smoothing* (método de Savitsky-Golay de terceira ordem) ao espectro útil de absorbâncias visando a melhoria da relação sinal-ruído. Ainda seguindo o procedimento adotado por Sakuma (2007), após a aplicação do filtro de *smoothing* o espectro útil foi reduzido para a faixa de 625 a 1585 nm, que foi utilizada pela rede neural na determinação dos teores de nitrogênio total e umidade pelos Métodos 1 e 3.

O gráfico do espectro após o *smoothing*, gerado no MATLAB, vem a seguir.

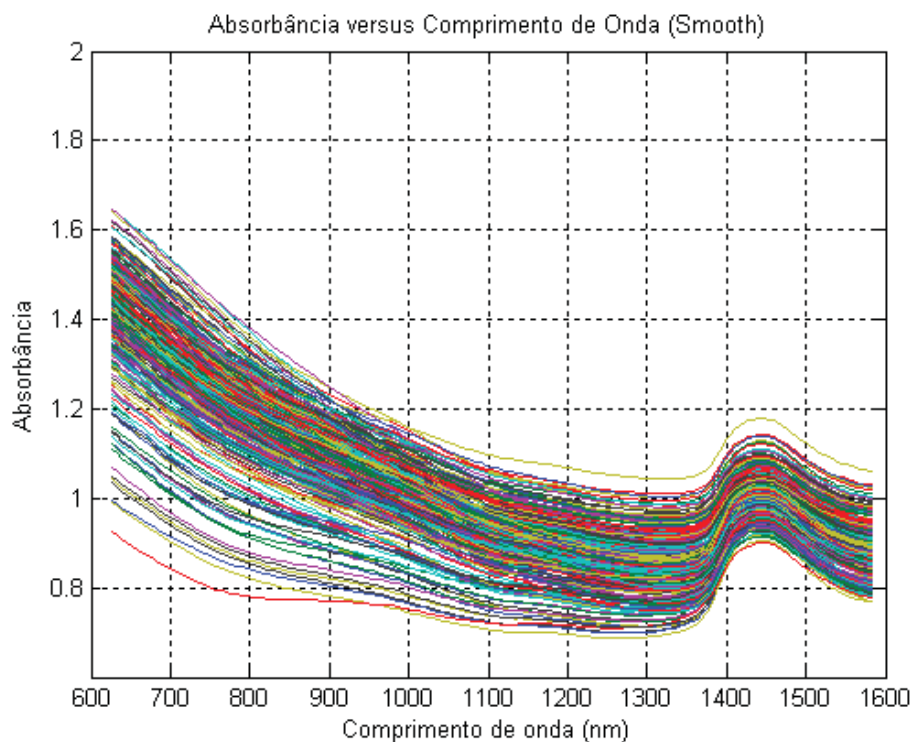


Figura 18 – Absorbância versus Comprimento de Onda (*Smooth*).

Sakuma (2007) também utilizou técnicas derivativas para o tratamento do espectro de absorbâncias. A derivada segunda do espectro foi utilizada para filtrar possíveis ruídos devido às vibrações do sensor RTSS geradas pela movimentação do trator durante a amostragem das absorbâncias.

Nas estimações do teor de nitrogênio total e umidade pelos Métodos 2 e 4, a rede neural recebe como entrada as informações após a aplicação da derivada segunda no espectro de absorbâncias.

O gráfico do espectro de absorbâncias resultante da derivação, gerado no MATLAB, vem a seguir.

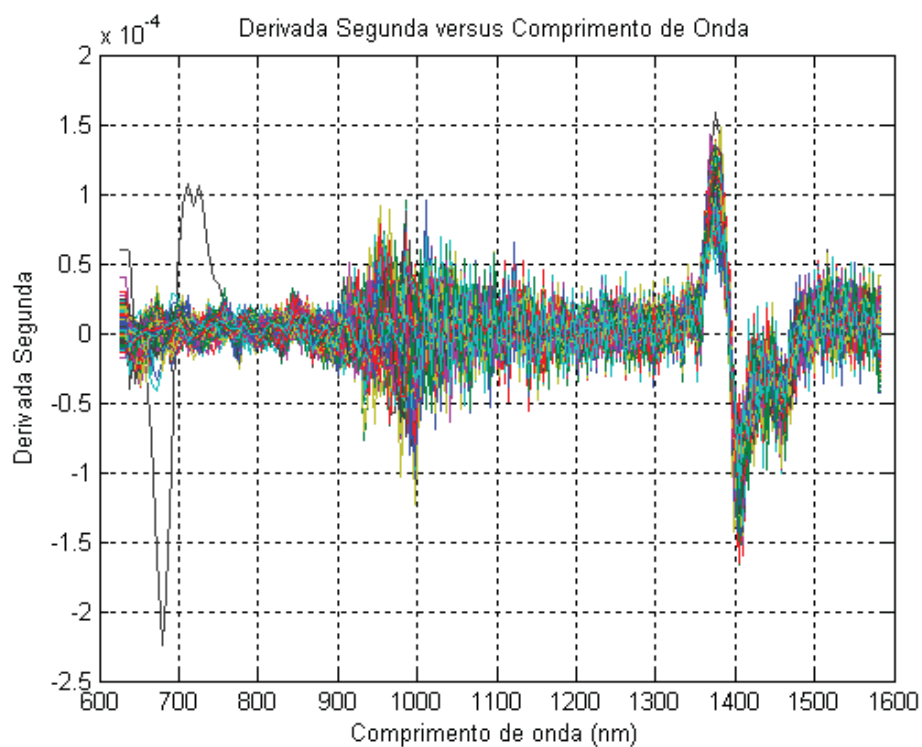


Figura 19 – Espectro resultante da aplicação da derivada segunda.

4.2 Nitrogênio Total – Método 1 (Rede PMC)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de nitrogênio total através de redes PMC, utilizando a metodologia prevista no Método 1.

A Tabela 1 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 1 para uma rede PMC com uma camada escondida e erro máximo de 1×10^{-5} para o treinamento.

Tabela 1 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 1).

Número de neurônios na camada escondida	Número de épocas do treinamento	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	99	1	0,501	0,436	0,013
	61	1	0,243		
	77	1	0,518		
	86	1	0,423		
	108	1	0,494		
10	63	1	0,416	0,271	0,027
	100	1	0,483		
	86	1	0,158		
	79	1	0,131		
	105	1	0,165		
8	119	1	0,468	0,281	0,030
	59	1	0,391		
	59	1	0,105		
	105	1	0,086		
	69	1	0,356		
5	106	1	0,257	0,216	0,002
	131	1	0,187		
	123	1	0,256		
	91	1	0,167		
	81	1	0,213		

A Tabela 2 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 1 para uma rede PMC com uma camada escondida e erro máximo de 1×10^{-3} para o treinamento.

Tabela 2 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).

Número de neurônios na camada escondida	Número de épocas do treinamento	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	88	0,992	0,536	0,474	0,013
	53	0,992	0,270		
	62	0,992	0,543		
	83	0,992	0,510		
	88	0,992	0,511		
10	87	0,990	0,310	0,383	0,034
	78	0,990	0,280		
	61	0,990	0,531		
	72	0,992	0,619		
	92	0,992	0,174		
8	80	0,996	0,246	0,342	0,028
	78	0,990	0,476		
	70	0,994	0,132		
	56	0,990	0,542		
	110	0,998	0,314		
5	105	0,990	0,384	0,284	0,009
	82	0,994	0,281		
	104	0,990	0,176		
	140	0,990	0,210		
	90	0,996	0,367		

A Tabela 3 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 1 para uma rede PMC com duas camadas escondidas e erro máximo de 1×10^{-5} para o treinamento.

Tabela 3 – Estimação de TN para rede PMC com duas camadas escondidas e erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 1).

Número de neurônios na camada escondida 1	Número de neurônios na camada escondida 2	Número de épocas do treinamento	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	10	79	1	0,507	0,375	0,022
		112	1	0,332		
		112	1	0,136		
		69	1	0,480		
		139	1	0,420		
10	5	156	1	0,097	0,305	0,022
		98	1	0,486		
		176	1	0,392		
		169	1	0,233		
		144	1	0,317		
5	2	73	1	0,112	0,217	0,005
		132	1	0,190		
		237	1	0,299		
		157	1	0,227		
		451	1	0,258		

A Tabela 4 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 1 para uma rede PMC com duas camadas escondidas e erro máximo de 1×10^{-3} para o treinamento.

Tabela 4 – Estimação de TN para rede PMC com duas camadas escondidas e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).

Número de neurônios na camada escondida 1	Número de neurônios na camada escondida 2	Número de épocas do treinamento	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	10	64	0,990	0,497	0,398	0,016
		89	0,990	0,187		
		62	0,990	0,494		
		91	0,990	0,421		
		85	0,990	0,392		
10	5	98	0,990	0,146	0,308	0,017
		67	0,990	0,504		
		157	0,990	0,318		
		127	0,990	0,249		
		114	0,990	0,321		
5	2	67	0,992	0,187	0,220	0,004
		104	0,992	0,224		
		220	0,990	0,298		
		146	0,992	0,254		
		280	0,990	0,135		

O número máximo de épocas adotado para o treinamento da rede neural foi 500. Configurações de rede neural com número de neurônios acima de 40 na camada escondida foram descartadas em função da não-convergência do treinamento devido a um erro de memória no *software* MATLAB. Configurações de rede neural com número de neurônios entre 20 e 40 na camada escondida ou número de camadas escondidas maior que 2 apresentaram tempo de treinamento superior a 30 minutos e também foram descartadas. Os resultados para as configurações de rede neural que foram descartadas não são mostrados neste trabalho.

O coeficiente de determinação médio e a variância (validação) foram calculados para avaliar o desempenho e a tendência de estabilidade da rede neural durante as cinco repetições do processo de estimação, uma vez que a inicialização dos pesos e limiares de ativação ocorre de maneira aleatória a cada repetição. Além disso, o sorteio das amostras previsto no método tende a gerar conjuntos de treinamento e validação diferentes a cada repetição.

A configuração de rede PMC que apresentou maior coeficiente de determinação médio no processo de estimação do teor de nitrogênio total pelo Método1 foi aquela com somente uma camada escondida formada por 15 neurônios e com erro de treinamento de 1×10^{-3} . A rede apresentou coeficiente de determinação médio de 0,474.

A configuração de rede PMC que apresentou valor máximo para o coeficiente de determinação no processo de estimação do teor de nitrogênio total pelo Método1 foi aquela

com somente uma camada escondida formada por 10 neurônios e com erro de treinamento de 1×10^{-3} . O coeficiente de determinação máximo obtido foi de 0,619.

4.3 Nitrogênio Total – Método 2 (Rede PMC)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de nitrogênio total através de redes PMC, utilizando a metodologia prevista no Método 2.

A Tabela 5 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 2 para a rede PMC que apresentou valor mais alto para o coeficiente de determinação médio via Método 1, que foi aquela configurada com 15 neurônios na camada escondida e erro de treinamento de 1×10^{-3} .

Tabela 5 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 2).

Número de neurônios na camada escondida	Número de épocas do treinamento	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	8	0,998	0,152	0,113	0,004
	10	0,996	0,181		
	10	0,994	0,041		
	11	0,998	0,144		
	8	0,994	0,045		

O tratamento derivativo no espectro de absorbâncias previsto no Método 2 levou a rede PMC a apresentar coeficiente de determinação médio inferior ao valor obtido no Método 1.

4.4 Nitrogênio Total – Método 1 (Rede RBF)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de nitrogênio total através de redes RBF, utilizando a metodologia prevista no Método 1.

A Tabela 6 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 1 para uma rede RBF com erro máximo de 1×10^{-5} para o treinamento.

Tabela 6 – Estimação de TN para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 1).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
0,5	236	1	0,320	0,247	0,011
	237	1	0,082		
	237	1	0,235		
	236	1	0,237		
	237	1	0,360		
1	236	1	0,587	0,317	0,037
	236	1	0,371		
	235	1	0,080		
	236	1	0,200		
	236	1	0,349		
5	237	1	0,150	0,259	0,012
	236	1	0,329		
	236	1	0,283		
	236	1	0,392		
	237	1	0,142		
10	236	1	0,310	0,174	0,007
	237	1	0,169		
	237	1	0,118		
	237	1	0,179		
	235	1	0,094		

A Tabela 7 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 1 para uma rede RBF com erro máximo de 1×10^{-3} para o treinamento.

Tabela 7 – Estimação de TN para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
0,5	227	1	0,228	0,230	0,002
	228	1	0,259		
	227	1	0,196		
	227	1	0,189		
	231	1	0,280		
1	227	1	0,229	0,312	0,018
	233	1	0,503		
	233	1	0,401		
	233	1	0,215		
	229	1	0,210		
5	233	1	0,379	0,320	0,010
	233	1	0,258		
	232	1	0,457		
	233	1	0,305		
	233	1	0,201		
10	233	1	0,153	0,250	0,012
	233	1	0,376		
	232	1	0,271		
	230	1	0,333		
	235	1	0,118		

Observou-se durante os testes que valores de variância da função de base radial abaixo de 1 (0,01 e 0,1 foram os valores utilizados) geraram redes neurais com pouca ou nenhuma capacidade de generalização. Embora tendo apresentado coeficiente de correlação igual a 1 para o conjunto de dados de treinamento, as redes apresentaram amplitudes de saída nula (para variância da função de base radial com valor 0,01) e próxima de zero (para variância da função de base radial com valor 0,1) quando submetidas ao conjunto de dados de validação. As configurações de rede neural acima citadas foram descartadas e seus resultados não são mostrados neste trabalho.

O coeficiente de determinação médio e a variância (validação) foram calculados para avaliar o desempenho e a tendência de estabilidade da rede neural durante as cinco repetições do processo de estimação, uma vez que a inicialização dos pesos e limiares de ativação ocorre de maneira aleatória a cada repetição. Além disso, o sorteio das amostras previsto no método tende a gerar conjuntos de treinamento e validação diferentes a cada repetição.

A configuração de rede RBF que apresentou coeficiente de determinação médio mais alto no processo de estimação do teor de nitrogênio total pelo Método1 foi aquela com variância da função de base radial igual a 5 e com erro de treinamento de 1×10^{-3} . A rede apresentou coeficiente de determinação médio de 0,320.

A configuração de rede RBF que apresentou valor máximo para o coeficiente de determinação no processo de estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 1 foi aquela com variância da função de base radial igual a 1 e com erro de treinamento de 1×10^{-5} . O coeficiente de determinação máximo obtido foi de 0,587.

4.5 Nitrogênio Total – Método 2 (Rede RBF)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de nitrogênio total através de redes RBF, utilizando a metodologia prevista no Método 2.

A Tabela 8 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 2 para a rede RBF que apresentou valor mais alto para o coeficiente de determinação médio via Método 1, que foi aquela configurada com variância da função de base radial igual a 5 e erro de treinamento de 1×10^{-3} .

Tabela 8 – Estimação de TN para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 2).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
5	233	1	0,245	0,216	0,010
	232	1	0,266		
	235	1	0,316		
	230	1	0,201		
	232	1	0,054		

O tratamento derivativo no espectro de absorbâncias previsto no Método 2 levou a rede RBF a apresentar coeficiente de determinação médio inferior ao valor obtido no Método 1.

4.6 Umidade – Método 1 (Rede PMC)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de umidade através de redes PMC, utilizando a metodologia prevista no Método 1.

A Tabela 9 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade para uma rede PMC com uma camada escondida e erro máximo de 1×10^{-3} para o treinamento.

Tabela 9 – Estimação de MC para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).

Número de neurônios na camada escondida	Número de épocas do treinamento	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	78	0,994	0,799	0,764	0,003
	104	0,994	0,691		
	91	0,994	0,821		
	97	0,994	0,714		
	73	0,994	0,794		
10	61	0,994	0,867	0,735	0,011
	64	0,994	0,707		
	83	0,994	0,615		
	67	0,994	0,671		
	88	0,994	0,817		
8	76	0,994	0,810	0,747	0,007
	81	0,994	0,783		
	60	0,994	0,740		
	78	0,994	0,799		
	90	0,994	0,604		
5	168	0,994	0,726	0,631	0,021
	154	0,994	0,640		
	82	0,994	0,812		
	64	0,994	0,511		
	382	0,994	0,464		

A Tabela 10 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade para uma rede PMC com duas camadas escondidas e erro máximo de 1×10^{-3} para o treinamento.

Tabela 10 – Estimação de MC para rede PMC com duas camadas escondidas e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).

Número de neurônios na camada escondida 1	Número de neurônios na camada escondida 2	Número de épocas do treinamento	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	10	99	0,994	0,536	0,686	0,018
		84	0,994	0,852		
		103	0,992	0,767		
		71	0,994	0,564		
		108	0,994	0,712		
10	5	109	0,994	0,570	0,667	0,006
		61	0,996	0,781		
		241	0,994	0,701		
		116	0,994	0,637		
		140	0,992	0,645		
5	2	186	0,994	0,627	0,721	0,004
		275	0,994	0,714		
		128	0,994	0,719		
		158	0,994	0,780		
		492	0,994	0,764		

O número máximo de épocas adotado para o treinamento da rede neural foi 500. Observou-se durante os testes que, para erro de treinamento igual a 1×10^{-5} , não ocorreu convergência no treinamento da rede, o que levou ao descarte desse valor de erro de treinamento na estimativa do teor de umidade.

Para erro de treinamento igual a 1×10^{-3} , configurações de rede neural com número de neurônios acima de 40 na camada escondida foram descartadas em função da não-convergência do treinamento devido a um erro de memória no *software* MATLAB. Configurações de rede neural com número de neurônios entre 20 e 40 na camada escondida ou número de camadas escondidas maior que 2 apresentaram tempo de treinamento superior a 30 minutos e também foram descartadas. Os resultados para as configurações de rede neural que foram descartadas não são mostrados neste trabalho.

O coeficiente de determinação médio e a variância (validação) foram calculados para avaliar o desempenho e a tendência de estabilidade da rede neural durante as cinco repetições do processo de estimação, uma vez que a inicialização dos pesos e limiares de ativação ocorre de maneira aleatória a cada repetição. Além disso, o sorteio das amostras previsto no método tende a gerar conjuntos de treinamento e validação diferentes a cada repetição.

A configuração de rede PMC que apresentou coeficiente de determinação médio mais alto no processo de estimação do teor de umidade foi aquela com somente uma camada

escondida formada por 15 neurônios e com erro de treinamento de 1×10^{-3} . A rede apresentou coeficiente de determinação médio de 0,764.

A configuração de rede PMC que apresentou valor máximo para o coeficiente de determinação no processo de estimação do teor de umidade foi aquela com somente uma camada escondida formada por 10 neurônios e com erro de treinamento de 1×10^{-3} . O coeficiente de determinação máximo obtido foi de 0,867.

4.7 Umidade – Método 2 (Rede PMC)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de umidade através de redes PMC, utilizando a metodologia prevista no Método 2.

A Tabela 11 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade pelo Método 2 para a rede PMC que obteve valor de coeficiente de determinação médio mais alto via Método 1, que foi aquela configurada com 15 neurônios na camada escondida e erro de treinamento de 1×10^{-3} .

Tabela 11 – Estimação de MC para rede PMC com uma camada escondida e erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 2).

Número de neurônios na camada escondida	Número de épocas do treinamento	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	9	1	0,835	0,727	0,011
	7	0,998	0,578		
	9	0,998	0,667		
	9	1	0,736		
	12	0,996	0,817		

O tratamento derivativo no espectro de absorbâncias previsto no Método 2 levou a rede PMC a apresentar coeficiente de correlação médio ligeiramente inferior ao valor obtido no Método 1.

4.8 Umidade – Método 1 (Rede RBF)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de umidade através de redes RBF, utilizando a metodologia prevista no Método 1.

A Tabela 12 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade para uma rede RBF com erro máximo de 1×10^{-5} para o treinamento.

Tabela 12 – Estimação de MC para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 1).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
0,5	236	1	0,596	0,590	0,028
	236	1	0,672		
	236	1	0,301		
	237	1	0,656		
	236	1	0,724		
1	236	1	0,627	0,467	0,043
	234	1	0,398		
	236	1	0,375		
	237	1	0,211		
	236	1	0,724		
5	234	1	0,750	0,712	0,002
	236	1	0,646		
	236	1	0,738		
	236	1	0,734		
	236	1	0,689		
10	236	1	0,750	0,595	0,031
	237	1	0,584		
	237	1	0,676		
	237	1	0,671		
	236	1	0,296		

A Tabela 13 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade para uma rede RBF com erro máximo de 1×10^{-3} para o treinamento.

Tabela 13 – Estimação de MC para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-3} (Método 1).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
0,5	232	1	0,677	0,591	0,013
	232	1	0,493		
	228	1	0,573		
	231	1	0,477		
	224	1	0,736		
1	231	1	0,753	0,658	0,015
	230	1	0,602		
	231	1	0,475		
	227	1	0,684		
	232	1	0,778		
5	232	1	0,121	0,403	0,121
	231	1	0,792		
	231	1	0,773		
	232	1	0,208		
	232	1	0,121		
10	230	1	0,771	0,695	0,006
	232	1	0,569		
	234	1	0,679		
	232	1	0,726		
	234	1	0,733		

Observou-se durante os testes que valores de variância da função de base radial abaixo de 1 (0,01 e 0,1 foram os valores utilizados) geraram redes neurais com pouca ou nenhuma capacidade de generalização. Embora tendo apresentado coeficiente de correlação igual a 1 para o conjunto de dados de treinamento, as redes apresentaram amplitudes de saída nula (para variância da função de base radial com valor 0,01) e próxima de zero (para variância da função de base radial com valor 0,1) quando submetidas ao conjunto de dados de validação. As configurações de rede neural acima citadas foram descartadas e seus resultados não são mostrados neste trabalho.

O coeficiente de determinação médio e a variância (validação) foram calculados para avaliar o desempenho e a tendência de estabilidade da rede neural durante as cinco repetições do processo de estimação, uma vez que a inicialização dos pesos e limiares de ativação ocorre de maneira aleatória a cada repetição. Além disso, o sorteio das amostras previsto no método tende a gerar conjuntos de treinamento e validação diferentes a cada repetição.

A configuração de rede RBF que apresentou valor mais alto para o coeficiente de determinação médio no processo de estimação do teor de umidade do solo foi aquela com

variância da função de base radial igual a 5 e com erro de treinamento de 1×10^{-5} . A rede apresentou coeficiente de determinação médio de 0,712.

A configuração de rede RBF que apresentou valor máximo para o coeficiente de determinação no processo de estimação do teor de umidade do solo foi aquela com variância da função de base radial igual a 5 e com erro de treinamento de 1×10^{-3} . O coeficiente de determinação máximo obtido foi de 0,792.

4.9 Umidade – Método 2 (Rede RBF)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de umidade através de redes RBF, utilizando a metodologia prevista no Método 2.

A Tabela 14 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade pelo Método 2 para a rede RBF que obteve valor de coeficiente de determinação médio mais alto via Método 1, que foi aquela configurada com variância da função de base radial igual a 5 e erro de treinamento de 1×10^{-5} .

Tabela 14 – Estimação de MC para rede RBF com erro de treinamento 1×10^{-5} (Método 2).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento)	R ² (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
5	237	1	0,752	0,685	0,004
	235	1	0,719		
	236	1	0,582		
	235	1	0,659		
	237	1	0,712		

O tratamento derivativo no espectro de absorbâncias previsto no Método 2 levou a rede RBF a apresentar coeficiente de determinação médio inferior ao valor obtido no Método 1.

4.10 Nitrogênio Total – Método 3 (Rede PMC)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de nitrogênio total através de redes PMC, utilizando a metodologia prevista no Método 3.

A Tabela 15 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 3 para uma rede PMC com uma camada escondida.

Tabela 15 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida (Método 3).

Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	0,874	0,739	0,629	0,009
	0,816	0,475		
	0,925	0,618		
	0,868	0,645		
	0,753	0,669		
10	0,896	0,501	0,552	0,001
	0,922	0,595		
	0,876	0,567		
	0,751	0,563		
	0,913	0,535		
8	0,662	0,747	0,665	0,003
	0,689	0,657		
	0,811	0,592		
	0,859	0,682		
	0,729	0,649		
5	0,761	0,522	0,563	0,002
	0,759	0,624		
	0,761	0,585		
	0,841	0,515		
	0,643	0,567		

A Tabela 16 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 3 para uma rede PMC com duas camadas escondidas.

Tabela 16 – Estimação de TN para rede PMC com duas camadas escondidas (Método 3).

Número de neurônios na camada escondida 1	Número de neurônios na camada escondida 2	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	10	0,881	0,672	0,616	0,005
		0,737	0,628		
		0,678	0,673		
		0,762	0,601		
		0,822	0,504		
10	5	0,668	0,717	0,649	0,005
		0,825	0,687		
		0,755	0,565		
		0,727	0,590		
		0,819	0,686		
5	2	0,569	0,426	0,531	0,012
		0,638	0,407		
		0,715	0,584		
		0,748	0,647		
		0,698	0,591		

O número máximo de épocas para o treinamento da rede neural previsto no Método 3 foi 100 (20 interrupções para validação a cada 5 épocas). Configurações de rede neural com número de neurônios acima de 40 na camada escondida foram descartadas em função da não-convergência do treinamento devido a um erro de memória no *software* MATLAB. Configurações de rede neural com número de neurônios entre 20 e 40 na camada escondida ou número de camadas escondidas maior que 2 apresentaram tempo de treinamento superior a 30 minutos e também foram descartadas. Os resultados para as configurações de rede neural que foram descartadas não são mostrados neste trabalho.

O coeficiente de determinação médio e a variância (validação) foram calculados para avaliar o desempenho e a tendência de estabilidade da rede neural durante as cinco repetições do processo de estimação, uma vez que a inicialização dos pesos e limiares de ativação ocorre de maneira aleatória a cada repetição. Além disso, o sorteio das amostras previsto no método tende a gerar conjuntos de treinamento e validação diferentes a cada repetição.

A configuração de rede PMC que apresentou os maiores valores para o coeficiente de determinação médio e para o coeficiente de determinação máximo no processo de estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 3 foi aquela com somente uma camada escondida formada por 8 neurônios. A rede apresentou coeficiente de determinação médio de 0,665 e coeficiente de determinação máximo de 0,747.

4.11 Nitrogênio Total – Método 4 (Rede PMC)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de nitrogênio total através de redes PMC, utilizando a metodologia prevista no Método 4.

A Tabela 17 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 4 para a rede PMC que apresentou valor mais alto para o coeficiente de determinação médio via Método 3, que foi aquela configurada com 8 neurônios na camada escondida.

Tabela 17 – Estimação de TN para rede PMC com uma camada escondida (Método 4).

Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
8	0,960	0,218	0,178	0,002
	0,996	0,189		
	1	0,213		
	1	0,172		
	0,908	0,098		

O número máximo de épocas para o treinamento da rede neural previsto no Método 4 foi 100 (20 interrupções para validação a cada 5 épocas).

O tratamento derivativo no espectro de absorbâncias previsto no Método 4 levou a rede PMC a apresentar coeficiente de determinação médio inferior ao valor obtido no Método 3.

4.12 Nitrogênio Total – Método 3 (Rede RBF)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de nitrogênio total através de redes RBF, utilizando a metodologia prevista no Método 3.

A Tabela 18 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 3 para uma rede RBF.

Tabela 18 – Estimação de TN para rede RBF (Método 3).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida para R ² máximo (validação)	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
0,5	50	0,707	0,564	0,444	0,006
	165	0,972	0,461		
	80	0,798	0,364		
	90	0,844	0,384		
	185	0,988	0,449		
1	40	0,670	0,696	0,576	0,006
	30	0,646	0,516		
	20	0,564	0,595		
	55	0,766	0,516		
	35	0,677	0,555		
5	10	0,502	0,651	0,583	0,007
	40	0,771	0,477		
	70	0,848	0,647		
	15	0,571	0,502		
	40	0,735	0,639		
10	50	0,781	0,738	0,643	0,007
	25	0,673	0,601		
	15	0,563	0,631		
	45	0,748	0,716		
	45	0,798	0,531		

Observou-se durante os testes que valores de variância da função de base radial abaixo de 1 (0,01 e 0,1 foram os valores utilizados) geraram redes neurais com pouca ou nenhuma capacidade de generalização. Tais redes apresentaram amplitudes de saída nula (para variância da função de base radial com valor 0,01) e próxima de zero (para variância da função de base radial com valor 0,1) quando submetidas ao conjunto de dados de validação. As configurações de rede neural acima citadas foram descartadas e seus resultados não são mostrados neste trabalho.

O coeficiente de determinação médio e a variância (validação) foram calculados para avaliar o desempenho e a tendência de estabilidade da rede neural durante as cinco repetições do processo de estimação, uma vez que a inicialização dos pesos e limiares de ativação ocorre de maneira aleatória a cada repetição. Além disso, o sorteio das amostras previsto no método tende a gerar conjuntos de treinamento e validação diferentes a cada repetição.

A configuração de rede RBF que apresentou os maiores valores para o coeficiente de determinação médio e para o coeficiente de determinação máximo no processo de estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 3 foi aquela com variância da função de base radial

igual a 10. A rede apresentou coeficiente de determinação médio de 0,643 e coeficiente de determinação máximo de 0,738.

4.13 Nitrogênio Total – Método 4 (Rede RBF)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de nitrogênio total através de redes RBF, utilizando a metodologia prevista no Método 4.

A Tabela 19 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 4 para a rede RBF que apresentou valor mais alto para o coeficiente de determinação médio via Método 3, que foi aquela configurada com variância da função de base radial igual a 10.

Tabela 19 – Estimação de TN para rede RBF (Método 4).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida para R ² máximo (validação)	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
10	10	0,264	0,164	0,334	0,019
	225	0,999	0,242		
	200	0,988	0,427		
	130	0,822	0,331		
	120	0,734	0,506		

O tratamento derivativo no espectro de absorbâncias previsto no Método 4 levou a rede RBF a apresentar coeficiente de determinação médio inferior ao valor obtido no Método 3.

4.14 Umidade – Método 3 (Rede PMC)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de umidade através de redes PMC, utilizando a metodologia prevista no Método 3.

A Tabela 20 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade pelo Método 3 para uma rede PMC com uma camada escondida.

Tabela 20 – Estimação de MC para rede PMC com uma camada escondida (Método 3).

Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	0,908	0,839	0,881	0,001
	0,919	0,879		
	0,925	0,893		
	0,935	0,899		
	0,953	0,897		
10	0,943	0,922	0,900	0,001
	0,923	0,889		
	0,944	0,869		
	0,943	0,918		
	0,914	0,904		
8	0,933	0,907	0,879	0,002
	0,924	0,908		
	0,933	0,887		
	0,945	0,793		
	0,900	0,902		
5	0,915	0,896	0,910	0,001
	0,936	0,932		
	0,942	0,889		
	0,923	0,918		
	0,942	0,915		

A Tabela 21 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade pelo Método 3 para uma rede PMC com duas camadas escondidas.

Tabela 21 – Estimação de MC para rede PMC com duas camadas escondidas (Método 3).

Número de neurônios na camada escondida 1	Número de neurônios na camada escondida 2	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
15	10	0,942	0,909	0,888	0,001
		0,958	0,862		
		0,932	0,902		
		0,962	0,863		
		0,951	0,903		
10	5	0,913	0,858	0,877	0,001
		0,935	0,899		
		0,913	0,890		
		0,907	0,891		
		0,923	0,845		
5	2	0,899	0,901	0,889	0,001
		0,931	0,884		
		0,943	0,884		
		0,937	0,869		
		0,906	0,907		

O número máximo de épocas para o treinamento da rede neural previsto no Método 3 foi 100 (20 interrupções para validação a cada 5 épocas). Configurações de rede neural com número de neurônios acima de 40 na camada escondida foram descartadas em função da não-convergência do treinamento devido a um erro de memória no *software* MATLAB. Configurações de rede neural com número de neurônios entre 20 e 40 na camada escondida ou número de camadas escondidas maior que 2 apresentaram tempo de treinamento superior a 30 minutos e também foram descartadas. Os resultados para as configurações de rede neural que foram descartadas não são mostrados neste trabalho.

O coeficiente de determinação médio e a variância (validação) foram calculados para avaliar o desempenho e a tendência de estabilidade da rede neural durante as cinco repetições do processo de estimação, uma vez que a inicialização dos pesos e limiares de ativação ocorre de maneira aleatória a cada repetição. Além disso, o sorteio das amostras previsto no método tende a gerar conjuntos de treinamento e validação diferentes a cada repetição.

A configuração de rede PMC que apresentou os maiores valores para o coeficiente de determinação médio e para o coeficiente de determinação máximo no processo de estimação do teor de umidade pelo Método 3 foi aquela com somente uma camada escondida formada por 5 neurônios. A rede apresentou coeficiente de determinação médio de 0,910 e coeficiente de determinação máximo de 0,932.

4.15 Umidade – Método 4 (Rede PMC)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de umidade através de redes PMC, utilizando a metodologia prevista no Método 4.

A Tabela 22 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade pelo Método 4 para a rede PMC que apresentou valor mais alto para o coeficiente de determinação médio via Método 3, que foi aquela configurada com 5 neurônios na camada escondida.

Tabela 22 – Estimação de MC para rede PMC com uma camada escondida (Método 4).

Número de neurônios na camada escondida	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
5	0,999	0,631	0,747	0,010
	0,943	0,857		
	0,902	0,817		
	0,905	0,773		
	0,861	0,658		

O número máximo de épocas para o treinamento da rede neural previsto no Método 4 foi 100 (20 interrupções para validação a cada 5 épocas).

O tratamento derivativo no espectro de absorbâncias previsto no Método 4 levou a rede PMC a apresentar coeficiente de determinação médio inferior ao valor obtido no Método 3.

4.16 Umidade – Método 3 (Rede RBF)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de umidade através de redes RBF, utilizando a metodologia prevista no Método 3.

A Tabela 23 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade pelo Método 3 para uma rede RBF.

Tabela 23 – Estimação de MC para rede RBF (Método 3).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida para R ² máximo (validação)	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
0,5	80	0,944	0,804	0,749	0,004
	115	0,975	0,659		
	125	0,979	0,728		
	135	0,985	0,799		
	40	0,872	0,754		
1	65	0,947	0,861	0,842	0,001
	50	0,928	0,838		
	55	0,938	0,828		
	60	0,938	0,802		
	70	0,939	0,883		
5	55	0,953	0,877	0,883	0,001
	20	0,917	0,851		
	15	0,900	0,925		
	20	0,915	0,898		
	10	0,889	0,864		
10	30	0,925	0,901	0,897	0,001
	25	0,919	0,913		
	30	0,925	0,888		
	55	0,940	0,893		
	10	0,897	0,889		

Observou-se durante os testes que valores de variância da função de base radial abaixo de 1 (0,01 e 0,1 foram os valores utilizados) geraram redes neurais com pouca ou nenhuma capacidade de generalização. Tais redes apresentaram amplitudes de saída nula (para variância da função de base radial com valor 0,01) e próxima de zero (para variância da função de base radial com valor 0,1) quando submetidas ao conjunto de dados de validação. As configurações de rede neural acima citadas foram descartadas e seus resultados não são mostrados neste trabalho.

O coeficiente de determinação médio e a variância (validação) foram calculados para avaliar o desempenho e a tendência de estabilidade da rede neural durante as cinco repetições do processo de estimação, uma vez que a inicialização dos pesos e limiares de ativação ocorre de maneira aleatória a cada repetição. Além disso, o sorteio das amostras previsto no método tende a gerar conjuntos de treinamento e validação diferentes a cada repetição.

A configuração de rede RBF que apresentou o maior valor para o coeficiente de determinação médio no processo de estimação do teor de umidade pelo Método 3 foi aquela com variância da função de base radial igual a 10. A rede apresentou coeficiente de determinação médio de 0,897.

A configuração de rede RBF que apresentou o maior valor para o coeficiente de determinação máximo no processo de estimação do teor de umidade pelo Método 3 foi aquela com variância da função de base radial igual a 5. A rede apresentou coeficiente de determinação máximo de 0,925.

4.17 Umidade – Método 4 (Rede RBF)

Nesta seção são apresentados os resultados da estimação do teor de umidade através de redes RBF, utilizando a metodologia prevista no Método 4.

A Tabela 24 apresenta os resultados obtidos na estimação do teor de umidade pelo Método 4 para a rede RBF que apresentou valor mais alto para o coeficiente de determinação médio via Método 3, que foi aquela configurada com variância da função de base radial igual a 10.

Tabela 24 – Estimação de MC para rede RBF (Método 4).

Variância da função de base radial	Número de neurônios na camada escondida para R ² máximo (validação)	R ² (treinamento) para R ² máximo (validação)	R ² máximo (validação)	R ² médio (validação)	Variância (validação)
10	5	0,815	0,872	0,853	0,003
	25	0,914	0,766		
	10	0,874	0,849		
	10	0,871	0,864		
	50	0,909	0,914		

O tratamento derivativo no espectro de absorbâncias previsto no Método 4 levou a rede RBF a apresentar coeficiente de determinação médio ligeiramente inferior ao valor obtido no Método 3.

4.18 Comparativos

Nesta seção são apresentados comparativos que permitem verificar o desempenho das redes neurais PMC e RBF na estimação dos teores de nitrogênio total e umidade do solo, utilizando como critério os valores do coeficiente de determinação obtidos na validação.

4.18.1 Comparativos para os métodos 1 e 2

A Tabela 25 apresenta um comparativo entre os dois tipos de rede neural ensaiados para estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 1, considerando os valores mais altos que foram obtidos para o coeficiente de determinação na validação.

Tabela 25 – Comparação entre as redes neurais na estimação de TN (Método 1).

Rede Neural	R ² médio	R ² máximo
PMC	0,474	0,619
RBF	0,320	0,587

A Tabela 26 apresenta um comparativo entre os dois tipos de rede neural ensaiados para estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 2.

Tabela 26 – Comparação entre as redes neurais na estimação de TN (Método 2).

Rede Neural	R ² médio	R ² máximo
PMC	0,113	0,181
RBF	0,216	0,316

A Tabela 27 apresenta um comparativo entre os dois tipos de rede neural ensaiados para estimação do teor de umidade pelo Método 1, considerando os valores mais altos que foram obtidos para o coeficiente de determinação na validação.

Tabela 27 – Comparação entre as redes neurais na estimação de MC (Método 1).

Rede Neural	R ² médio	R ² máximo
PMC	0,764	0,867
RBF	0,712	0,792

A Tabela 28 apresenta um comparativo entre os dois tipos de rede neural ensaiados para estimação do teor de umidade pelo Método 2.

Tabela 28 – Comparação entre as redes neurais na estimação de MC (Método 2).

Rede Neural	R ² médio	R ² máximo
PMC	0,727	0,835
RBF	0,685	0,752

A Tabela 29 apresenta um comparativo entre os maiores valores para os coeficientes de determinação de validação máximos obtidos para os dois tipos de rede neural ensaiados e os coeficientes de determinação de validação obtidos através de regressão PLS via *software* UNSCRAMBLER, utilizado por Sakuma (2007).

Tabela 29 – Comparação entre as redes neurais e o *software* UNSCRAMBLER (R²) – Métodos 1 e 2.

Propriedade do Solo	Rede PMC R ² máximo (2005 e 2006)	Rede RBF R ² máximo (2005 e 2006)	UNSCRAMBLER R ² (2005)	UNSCRAMBLER R ² (2006)
TN	0,619	0,587	0,569	0,515
MC	0,867	0,792	0,836	0,893

Considerando a rede neural PMC, que obteve os maiores valores para o coeficiente de determinação de validação, a Tabela 30 apresenta um comparativo entre os valores de RMSE obtidos pela rede e os valores obtidos por Sakuma (2007).

Tabela 30 – Comparação entre a rede neural PMC e o *software* UNSCRAMBLER (RMSE) – Métodos 1 e 2.

PMC (2005 e 2006)		UNSCRAMBLER (2005)		UNSCRAMBLER (2006)	
TN RMSE (mg/100g)	MC RMSE (%)	TN RMSE (mg/100g)	MC RMSE (%)	TN RMSE (mg/100g)	MC RMSE (%)
0,02318	2,2755	0,0177	1,9158	0,0190	2,0786

4.18.2 Comparativos para os métodos 3 e 4

A Tabela 31 apresenta um comparativo entre os dois tipos de rede neural ensaiados para estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 3, considerando os valores mais altos que foram obtidos para o coeficiente de determinação na validação.

Tabela 31 – Comparação entre as redes neurais na estimação de TN (Método 3).

Rede Neural	R ² médio	R ² máximo
PMC	0,665	0,747
RBF	0,643	0,738

A Tabela 32 apresenta um comparativo entre os dois tipos de rede neural ensaiados para estimação do teor de nitrogênio total pelo Método 4.

Tabela 32 – Comparação entre as redes neurais na estimação de TN (Método 4).

Rede Neural	R ² médio	R ² máximo
PMC	0,178	0,218
RBF	0,334	0,506

A Tabela 33 apresenta um comparativo entre os dois tipos de rede neural ensaiados para estimação do teor de umidade pelo Método 3, considerando os valores mais altos que foram obtidos para o coeficiente de determinação na validação.

Tabela 33 – Comparação entre as redes neurais na estimação de MC (Método 3).

Rede Neural	R ² médio	R ² máximo
PMC	0,910	0,932
RBF	0,897	0,925

A Tabela 34 apresenta um comparativo entre os dois tipos de rede neural ensaiados para estimação do teor de umidade pelo Método 4.

Tabela 34 – Comparação entre as redes neurais na estimação de MC (Método 4).

Rede Neural	R ² médio	R ² máximo
PMC	0,747	0,857
RBF	0,853	0,914

A Tabela 35 apresenta um comparativo entre os maiores valores para os coeficientes de determinação de validação máximos obtidos para os dois tipos de rede neural ensaiados e os coeficientes de determinação de validação obtidos através de regressão PLS via *software* UNSCRAMBLER, utilizado por Sakuma (2007).

Tabela 35 – Comparação entre as redes neurais e o *software* UNSCRAMBLER (R²) – Métodos 3 e 4.

Propriedade do Solo	Rede PMC R ² máximo (2005 e 2006)	Rede RBF R ² máximo (2005 e 2006)	UNSCRAMBLER R ² (2005)	UNSCRAMBLER R ² (2006)
TN	0,747	0,738	0,569	0,515
MC	0,932	0,925	0,836	0,893

Considerando a rede neural PMC, que obteve os maiores valores para o coeficiente de determinação de validação, a Tabela 36 apresenta um comparativo entre os valores de RMSE obtidos pela rede e os valores obtidos por Sakuma (2007).

Tabela 36 – Comparação entre a rede neural PMC e o *software* UNSCRAMBLER (RMSE) – Métodos 3 e 4.

PMC (2005 e 2006)		UNSCRAMBLER (2005)		UNSCRAMBLER (2006)	
TN RMSE (mg/100g)	MC RMSE (%)	TN RMSE (mg/100g)	MC RMSE (%)	TN RMSE (mg/100g)	MC RMSE (%)
0,0150	1,6012	0,0177	1,9158	0,0190	2,0786

4.19 Gráficos Ilustrativos

Nesta seção são apresentados gráficos ilustrativos do desempenho das redes neurais na estimação dos teores de nitrogênio total e umidade. Foram escolhidas as redes neurais que

apresentaram os maiores valores para o coeficiente de determinação máximo quando submetidas ao conjunto de dados de validação (vide Tabelas 29 e 35).

Os gráficos, gerados via MATLAB, são exibidos com os dados na forma normalizada citada na metodologia.

O gráfico a seguir mostra o desempenho da rede PMC aplicando-se como entrada o conjunto de validação para nitrogênio total (Método 1).

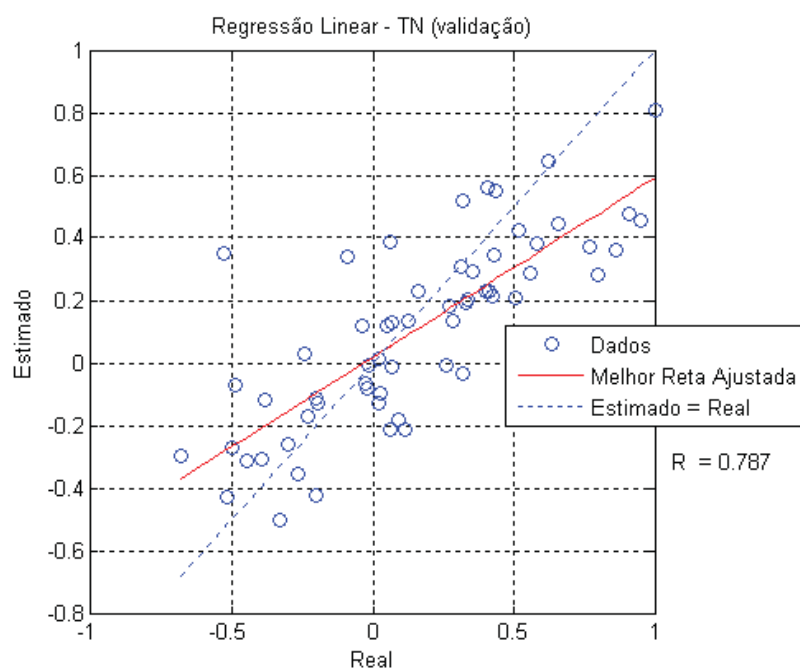


Figura 20 – Regressão linear para o conjunto de validação – TN (Rede PMC - Método 1).

O gráfico a seguir mostra o desempenho da rede PMC aplicando-se como entrada o conjunto de validação para teor de umidade (Método 1).

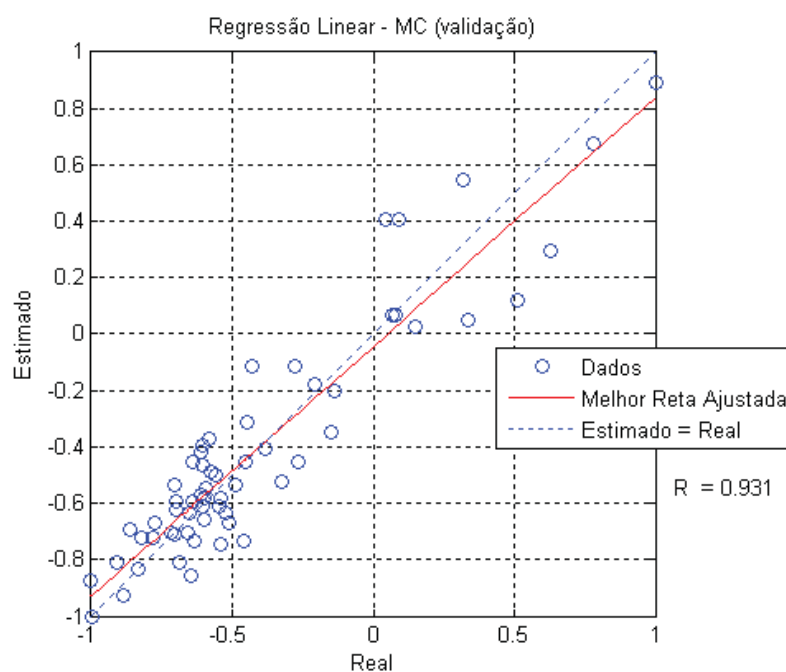


Figura 21 – Regressão linear para o conjunto de validação – MC (Rede PMC – Método 1).

Os gráficos a seguir mostram o desempenho da rede PMC aplicando-se como entrada o conjunto de validação para nitrogênio total e o comportamento dos índices R^2 e RMSE em função do número de épocas (Método 3).

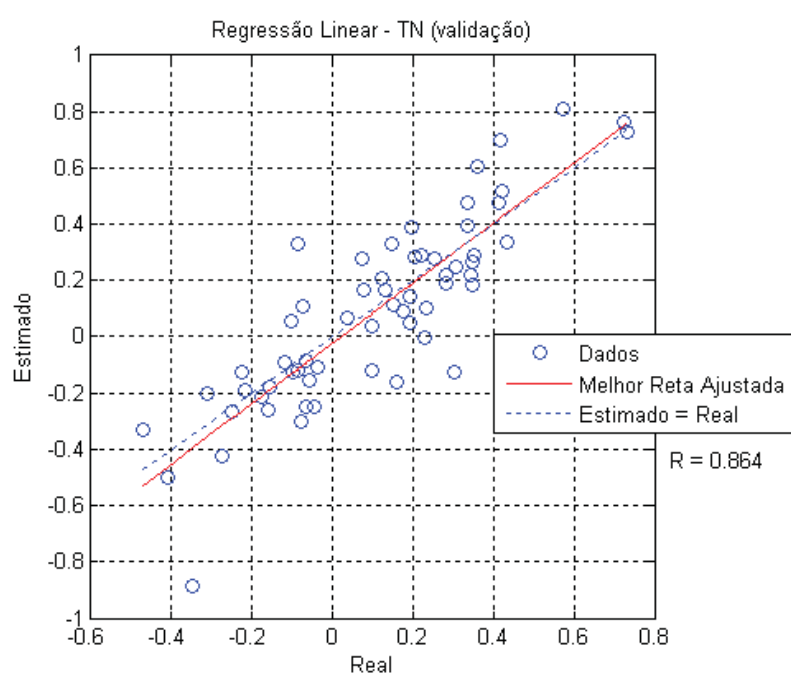


Figura 22 – Regressão linear para o conjunto de validação – TN (Rede PMC – Método 3).

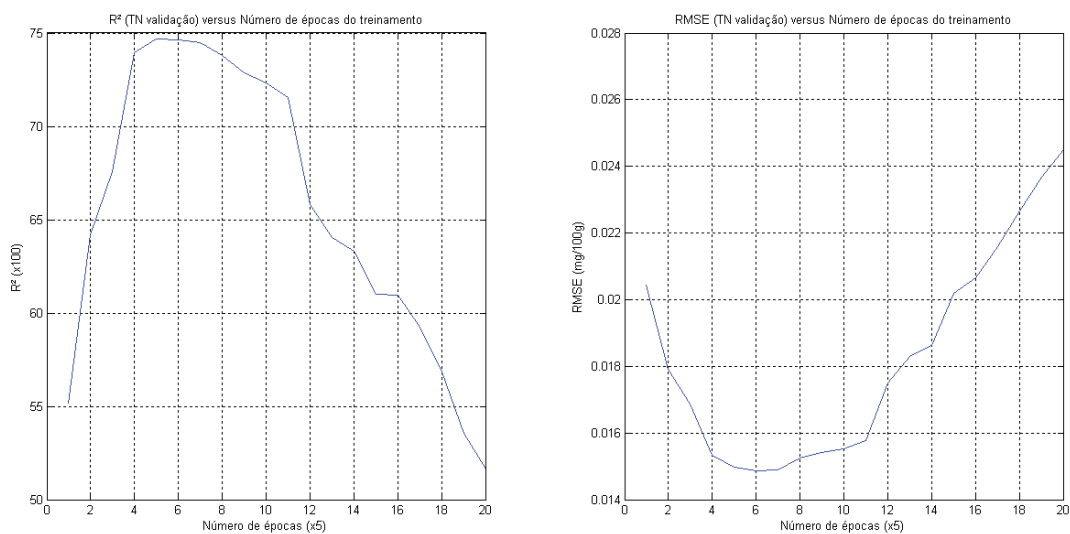


Figura 23 – Comportamento dos índices R^2 e RMSE em função do número de épocas do treinamento (TN validação - Rede PMC - Método 3).

Os gráficos a seguir mostram o desempenho da rede PMC aplicando-se como entrada o conjunto de validação para umidade e o comportamento dos índices R^2 e RMSE em função do número de épocas (Método 3).

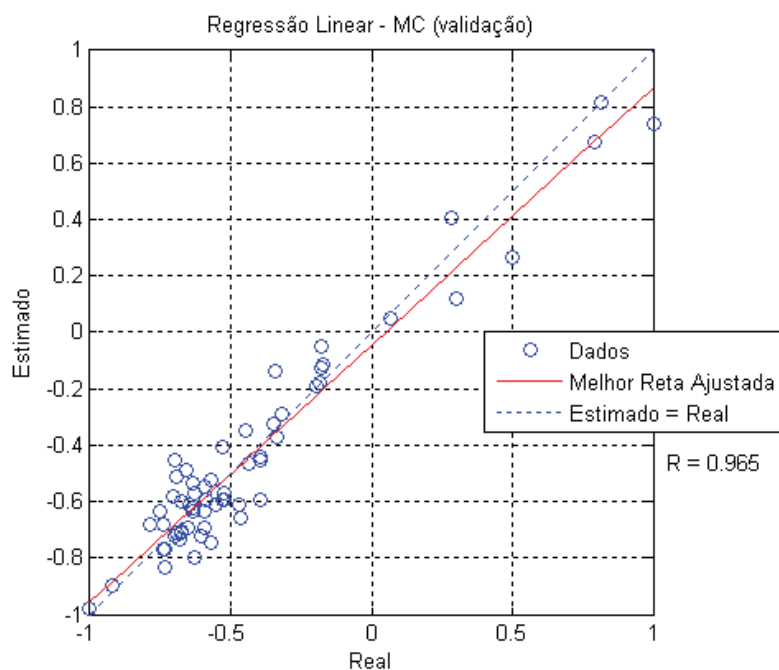


Figura 24 – Regressão linear para o conjunto de validação – MC (Rede PMC – Método 3).

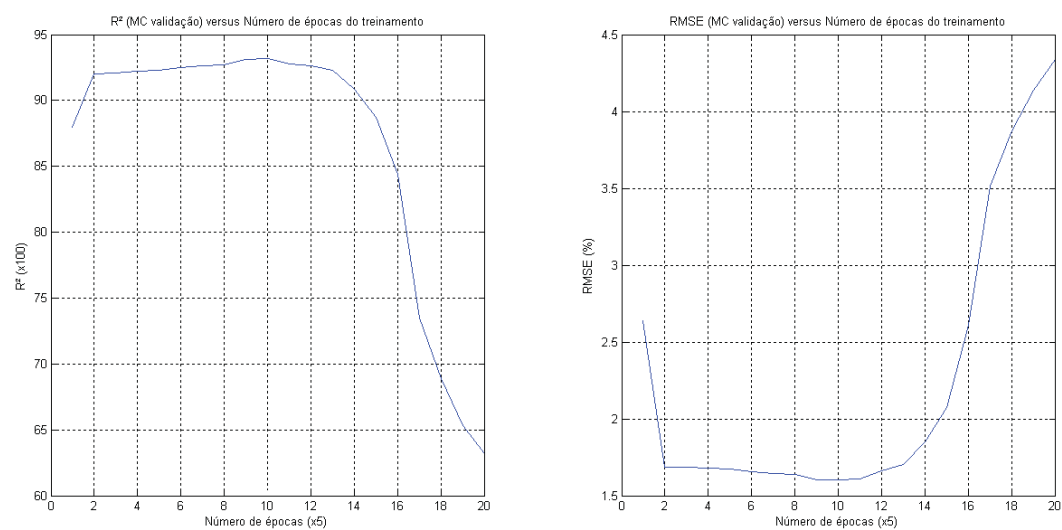


Figura 25 – Comportamento dos índices R^2 e RMSE em função do número de épocas do treinamento (MC validação - Rede PMC - Método 3).

5 CONCLUSÕES

5.1 Conclusões Gerais

Na estimação dos teores de nitrogênio total e umidade utilizando os Métodos 1 e 3, considerando os valores máximos para o coeficiente de determinação, o desempenho das redes neurais PMC e RBF, para os diferentes conjuntos de treinamento e validação previstos na metodologia, podem ser considerados equivalentes.

Embora Sakuma (2007) tenha utilizado o tratamento derivativo na estimativa dos teores de nitrogênio total e umidade, tal abordagem (Métodos 2 e 4) não melhorou os resultados obtidos pelas redes neurais PMC e RBF na estimação do teor de nitrogênio total a partir dos dados sem o tratamento derivativo (Métodos 1 e 3). Para a estimação do teor de umidade, as redes neurais PMC e RBF, quando submetidas aos dados da derivada segunda (Métodos 2 e 4), apresentaram coeficientes de determinação equivalentes aos coeficientes obtidos a partir dos dados sem o tratamento derivativo (Métodos 1 e 3).

No melhor caso para os Métodos 1 e 2, a rede PMC apresentou coeficiente de determinação superior aos coeficientes obtidos pelo *software* UNSCRAMBLER na estimação do teor de nitrogênio total. Para a estimação do teor de umidade, no melhor caso para os Métodos 1 e 2, o coeficiente de determinação foi equivalente ao coeficiente obtido pelo *software* UNSCRAMBLER.

No melhor caso para os Métodos 1 e 2, a rede RBF apresentou coeficiente de determinação equivalente aos coeficientes obtidos pelo *software* UNSCRAMBLER na estimação do teor de nitrogênio total. Para a estimação do teor de umidade, o coeficiente de determinação obtido pela rede foi inferior aos coeficientes obtidos pelo *software* UNSCRAMBLER.

No melhor caso para os Métodos 3 e 4, as redes PMC e RBF apresentaram coeficientes de determinação superiores aos coeficientes obtidos pelo *software* UNSCRAMBLER na estimação dos teores de nitrogênio total e umidade.

Com relação ao índice RMSE, a rede neural que apresentou melhor coeficiente de determinação de validação (rede PMC) apresentou desempenho ligeiramente inferior ao *software* UNSCRAMBLER pelo Método 1 e apresentou desempenho superior ao *software* UNSCRAMBLER pelo Método 3.

O presente trabalho mostra ser possível a utilização de sistemas inteligentes baseados em redes neurais como ferramenta alternativa aos *softwares* de aplicação em quimiometria para estimação de propriedades químicas, como o teor de nitrogênio total e físicas do solo, como o teor de umidade.

A utilização de redes neurais permite ainda embarcar a inteligência de estimação em equipamentos de baixo custo para análise de solo em tempo real (*online*), tendo utilização preferencial sobre os *softwares* de análise quimiométrica, já que estes são ferramentas para uso *offline*.

5.2 Sugestões de Continuidade

A utilização de outras ferramentas inteligentes baseadas em sistemas de inferência *neuro-fuzzy* (ANFIS – *adaptive neuro-fuzzy inference system*) para comparação de desempenho e o levantamento de uma base de dados baseada em espectroscopia com amostras de solo brasileiro para teste dos sistemas inteligentes baseados em redes neurais apresentados aqui são sugestões de continuidade para o presente trabalho.

REFERÊNCIAS

- ADAMCHUK V. I. et al. On-the-go soil sensors for precision agriculture. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 44, p. 71–91, 2004.
- AMARAL, L. R. do. **Sensor ótico no auxílio à recomendação de nitrogênio para a cultura de cana-de-açúcar**. 2010. 81 f. Dissertação (Mestrado em Ciências Agrárias) - Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2010.
- ANTSAKLIS, P. J. Neural Networks in Control Systems. **IEEE Control Systems Magazine**, v. 12, p. 8-10, 1992.
- BAIDYK, T. et al. Neural classifier for larvae recognition. In: **IJCNN 2010 - International Joint Conference on Neural Networks**, p. 1-4, Barcelona, 2010.
- BALASTREIRE, L. A. **O estado da arte da Agricultura de Precisão no Brasil**. Piracicaba: L.A. Balastreire, 2000. 224 p.
- BASTOS, R. F. et al. Formação e estabilização de agregados do solo influenciados por ciclos de umedecimento e secagem após adição de compostos orgânicos com diferentes características hidrofóbicas. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 29, n. 1, p. 21-31, 2005.
- BATTITI, R. First end second order methods for learning: between steepest descent and Newton’s method. **Neural Computation**, v. 4, p. 141-166, 1992.
- BEN-DOR, E. et al. A novel method of classifying soil profiles in the field using optical means. **Soil Science Society of America Journal**, v. 72, n. 4, p. 1113-1123, 2008.
- BRAGA, A. P. et al. **Redes neurais artificiais: teoria e aplicações**. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2000. 262 p.
- CAMO PROCESS AS. **The Unscrambler tutorials**, 2006. 173 p. Disponível em: <<http://www.camo.com/downloads/U9.6%20pdf%20manual/The%20Unscrambler%20Tutorials.pdf>>. Acesso em: 29 maio 2011.
- CEPEA. **PIB do Agronegócio**. Disponível em: <http://www.cepea.esalq.usp.br/pib/other/Pib_Cepea_1994_2009.xls>. Acesso em: 26 mar. 2011.
- CHANG, C. W. et al. Near-infrared reflectance spectroscopy–principal components regression analyses of soil properties. **Soil Science Society of America Journal**, v. 65, p. 480-490, 2001.
- CHRISTY, C. D. Real-time measurement of soil attributes using on-the-go near infrared reflectance spectroscopy. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 61, p. 10-19, 2008.
- COELHO, A. M. **Agricultura de precisão: manejo da variabilidade espacial e temporal dos solos e culturas**. Sete Lagoas: Embrapa Milho e Sorgo, 2005. 60 p.
- CONKLIN, A. R. **Introduction to soil chemistry: analysis and instrumentation**. New Jersey: John Wiley & Sons Inc., 2005. 218 p.
- CORREIA, M. A. R. **Efeitos da calagem na fertilidade do solo, nutrição, crescimento e produção da mangueira**. 2009. 65 f. Dissertação (Mestrado em Agronomia) - Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, Universidade Estadual Paulista, Jaboticabal, 2009.

COTTA, J. A. O. et al. Validação do método para determinação de nitrogênio Kjeldahl total. **Revista Analytica**, v. 26, p. 68-75, 2006.

CRUVINEL, P. E. **Instrumentação agropecuária no agronegócio brasileiro do século XXI: Parte 1**. Disponível em: <<http://www.embrapa.br/imprensa/artigos/2000/artigo.2004-12-07.2432500046>>. Acesso em: 27 mar. 2011.

DALMOLIN, R. S. D. et al. Relação entre os constituintes do solo e seu comportamento espectral. **Ciência Rural**, v. 35, n. 2, p. 481-489, 2005.

EMBRAPA. **Tipos de análise de solos**. Disponível em: <http://www.cnps.embrapa.br/servicos/tipo_analise.html>. Acesso em: 02 abr. 2011.

EMBRAPA. **Amostragem de solos: a base para aplicação de corretivos e fertilizantes**. Disponível em: <http://www.cnpms.embrapa.br/publicacoes/milho_6_ed/feramostra.htm>. Acesso em: 18 jun. 2011.

FERRARINI, H. **Determinação de teores nutricionais do milho por espectroscopia no infravermelho e calibração multivariada**. 2004. 107 f. Dissertação (Mestrado em Química) – Setor de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2004.

FERREIRA, M. M. C. et al. Quimiometria I: calibração multivariada, um tutorial. **Química Nova**, v. 22, n. 5, p. 724-731, 1999.

FRANCO, L. **Tendências do agronegócio brasileiro para 2011**. Disponível em: <<http://www.revistagloborural.globo.com/Revista/Common/0,,ERT201112-18282,00.html>>. Acesso em: 26 mar. 2011.

GELADI, P.; KOWALSKI, B. Partial least square regression: a tutorial. **Analytica Chimica Acta**, v. 185, p. 1-17, 1986.

HAGAN, M.T.; MENHAJ, M.B. Training feedforward networks with Marquardt algorithm. **IEEE Transactions on Neural Networks**, v. 5, p. 989-993, 1994.

HAYKIN, S. **Neural networks: a comprehensive foundation**. New Jersey: McMillan Inc., 1999. 842 p.

HAYKIN, S. **Redes neurais: princípios e prática**. Porto Alegre: Bookman, 2001. 900 p.

IAC. **Como enviar amostras**. Disponível em: <<http://iac.impulsa.com.br/produtoseservicos/analisedosolo/enviaramostrasolo.php>>. Acesso em: 26 jun. 2011.

IAC. **Análises de fertilidade do solo**. Disponível em: <<http://iac.impulsa.com.br/produtoseservicos/analisedosolo/analisefertilidade.php>>. Acesso em: 26 jun. 2011.

KALEITA, A. L. et al. Relationship between soil moisture content and soil surface reflectance. **Transactions of the ASAE**, v. 48, n. 5, p. 1979-1986, 2005.

KARLEN, D. L. et al. Soil quality: why and how?. **Geoderma**, v. 114, p. 145-156, 2003.

LEE, K. S. et al. Sampling and calibration requirements for optical reflectance soil property sensors for Korean paddy soils. **Journal of Biosystems Engineering**, v. 33, n. 4, p. 260-268, 2008.

LIMA, K. M. G. et al. Determinação não destrutiva do nitrogênio total em plantas por espectroscopia de reflectância difusa no infravermelho próximo. **Química Nova**, v. 31, n. 3, p. 700-703, 2008.

LOWENBERG-DEBOER, J. The management time economics of on-the-go sensing for nitrogen application, **SSMC Newsletter**, 2004.

MALAVOLTA, E.; MORAES, M. F. de. **O nitrogênio na agricultura brasileira**. Série Estudos e Documentos SED-70, CETEM/MCT, 2006. 72 p.

McCULLOCH, W. S. A logical calculus of ideas immanent in nervous activity. **Bulletin of mathematical Biophysics**, v. 5, p. 115-113, 1943.

MIGUEL, F. R. M. et al. Correlação espacial entre a produtividade da cana-de-açúcar e atributos químicos do solo. In: Congresso Brasileiro de Agricultura de Precisão, 2010, Ribeirão Preto, SP. **Anais...** Ribeirão Preto, SP: ABEA, 2010.

MINISTÉRIO DA AGRICULTURA. **Balança comercial**. Disponível em: <<http://www.agricultura.gov.br/portal/page/portal/Internet-MAPA/pagina-inicial/vegetal/noticias/noticia-aberta?noticiald=31416>>. Acesso em: 26 mar. 2011.

MINISTÉRIO DA AGRICULTURA. **Mercado interno**. Disponível em: <<http://www.agricultura.gov.br/portal/page/portal/Internet-MAPA/pagina-inicial/vegetal/mercado-interno>>. Acesso em: 27 mar. 2011.

MINISTÉRIO DA AGRICULTURA. **Exportação**. Disponível em: <<http://www.agricultura.gov.br/portal/page/portal/Internet-MAPA/pagina-inicial/vegetal/exportacao>>. Acesso em: 27 mar. 2011.

MORELATTO, S. A. **Modelos de regressão PLS com erros heteroscedásticos**. 2010. 49 f. Dissertação (Mestrado em Estatística) – Departamento de Estatística, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2010.

NAGAOKA, M. E. et al. Um método para estimar densidade do solo utilizando redes neurais artificiais. **Energia na Agricultura**, v. 20, n. 2, p. 53-68, 2005.

NARENDRA, K.S.; PARTHASARATHY, K. Identification and control of dynamical systems using neural networks. **IEEE Transactions on Neural Networks**, v. 1, p. 4-27, 1990.

NASCIMENTO, P. dos S. et al. Estudo comparativo de métodos para a determinação da curva de retenção de água no solo. **Irriga**, v. 15, n. 2, p. 193-207, 2010.

NOH, H. et al. A neural network model of maize crop nitrogen stress assessment for a multi-spectral imaging sensor. **Biosystems Engineering**, v. 94, n. 4, p. 477-485, 2006.

O'HARVER, T. **Intro. to signal processing: differentiation**. Department of Chemistry and Biochemistry, The University of Maryland at College Park. Disponível em: <<http://terpconnect.umd.edu/~toh/spectrum/Differentiation.html#Spectroscopy>>. Acesso em: 27 mar. 2011.

PANSU, M.; GAUTHEYROU, J. **Handbook of soil analysis: mineralogical, organic and inorganic methods**. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006. 993 p.

PINTO, A. C. S. et al. Descrição da epidemia da ferrugem do cafeeiro com redes neuronais. **Fitopatologia Brasileira**, v. 2, n. 5, p. 517-524, 2002.

REZENDE, S. O. **Sistemas inteligentes: fundamentos e aplicações**. Barueri: Manole, 2003. 550 p.

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

RUMELHART, D.E. et al. **Parallel Distributed Processing**. Massachusetts: MIT Press, 1986. 567 p.

SAKUMA, D. Y. **Improved prediction model for nitrogen management using the real time soil sensor data**. 2007. 90 f. Dissertação (Mestrado) - Tokyo University of Agriculture and Technology, Tokyo, 2007.

SANTOS, J. D. **A influência de diferentes sistemas agrícolas nas propriedades físicas e químicas das camadas superficiais do solo – São José da Lapa / MG**. 2007. 75 f. Dissertação (Mestrado em Geografia) - Departamento de Geografia, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2007.

SAVITZKY, A.; GOLAY, M. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. **Analytical Chemistry**, v. 36, n. 8, p. 1627-1639, 1964.

SENA JÚNIOR, D. G. de et al. Algoritmo para classificação de plantas de milho atacadas pela lagarta do cartucho (*Spodoptera frugiperda*, Smith) em imagens digitais. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 5, n. 3, p. 502-509, 2001.

SHIBUSAWA, S. On-line real time soil sensor. **Proceedings of the 2003 IEEE/ASME International Conference on Advanced Intelligent Mechatronics (AIM 2003)**, 2003.

SONG, H.; HE, Y. Evaluating soil organic matter with visible spectroscopy. In: **IMTC 2005 - Instrumentation and Measurement Technology Conference**, p. 1321-1324, Ottawa, 2005.

STENBERG, B. et al. Visible and near infrared spectroscopy in soil science. **Advances in Agronomy**, v. 107, p. 163-215, 2010.

TETYUEV, A. et al. Soil type characterization for moisture measurement by impedance spectroscopy. In: **IMTC 2006 - Instrumentation and Measurement Technology Conference**, p. 735-740, Sorrento, 2006.

VELOSO, M. E. da C. **Potencialidade de impacto ambiental por nitrato, doses de N, flutuações do lençol freático para a cultura do milho sob sistema de drenagem**. 2006. 126 f. Dissertação (Doutorado em Agronomia) - Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2006.

VIEIRA, R. F.; SILVA, C. M. M. de S. Indicadores de qualidade do solo: desenvolvimento de índices. In: Congreso Virtual Iberoamericano sobre Gestión de Calidad en Laboratorios, 2003, Valladolid. **Resúmenes...** Valladolid: Itacyl, 2003.

VISCARRA ROSSEL, R. A. et al. Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. **Geoderma**, v. 131, p. 59-75, 2006.

VISCARRA ROSSEL, R. A. The Soil Spectroscopy Group and the development of a global soil spectral library. **Geophysical Research Abstracts**, v. 11, EGU2009-14021, 2009.

WANG, W. Vehicle type recognition based on radial basis function neural networks. In: **IJCNN 2009 - International Joint Conference on Neural Networks**, p. 444-447, Atlanta, 2009.

WIDROW, B. **Generalization and information storage in networks of adaline neurons**. In M.C. Yovitz, G.T. Jacobi, and G.D. Goldstein, eds., *Self-Organization systems*, Washington DC: Spartan Books, p. 435-461, 1962.

ZALAMENA, J. **Impacto do uso da terra nos atributos químicos e físicos de solos do rebordo do planalto – RS**. 2008. 79 f. Dissertação (Mestrado em Ciência do Solo). Centro de Ciências Rurais, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2008.

ZHENG, G.; ZHOU S. Possibilities of reflectance spectroscopy to predict soil arsenic. In: **The 1st International Conference on Information Science and Engineering (ICISE2009)**, p. 4990-4992, Nanjing, 2009.

APÊNDICE A – ESTRUTURA DA BASE DE DADOS

Esta seção apresenta informações sobre a organização dos dados na base de dados utilizada neste trabalho.

A base de dados utilizada neste trabalho está organizada em duas planilhas (arquivo *x/s*), uma contendo informações sobre o ano de 2005 e a outra sobre o ano de 2006. Cada linha da planilha possui informações referentes a uma amostra de solo específica. As Figuras 26 e 27 mostram trechos das planilhas para ilustrar a estrutura das informações relacionadas com cada amostra de solo na base de dados.

Identificação da amostra de solo		Coordenadas relativas da amostra de solo			Propriedades da amostra de solo			
A	B	E	F	G	H	I	J	K
Des ID		Xm	Ym	Zm	Load (kN)	Disp (mm)	WC (%)	PH
1	1	6.27500000	0.03000000	128.31000000	42.51800000	68.32000000	28.86597638	6.43000000
2	5	6.16500000	1.89800000	128.25000000	5.88300000	68.75500000	31.92612137	6.40000000
3	10	6.69200000	7.09300000	128.17000000	6.76300000	68.31200000	32.16039030	6.42000000
4	15	6.70900000	10.68700000	128.16000000	5.54200000	100.42700000	31.23339000	6.47000000
5	20	6.43900000	15.14100000	128.17000000	5.77100000	68.92700000	30.20033030	6.50000000
6	25	5.14300000	18.75000000	128.20000000	7.48000000	68.38900000	28.86597638	6.33000000
7	30	4.83800000	24.38600000	128.22000000	8.70800000	68.43900000	28.70012670	6.36000000
8	35	4.52400000	28.08800000	128.31000000	7.36400000	67.81200000	28.18895841	6.41000000
9	40	4.21900000	33.73600000	128.38000000	8.36400000	67.75600000	28.53470437	6.32000000
10	45	3.82300000	38.41700000	128.41000000	8.52700000	68.39300000	28.20512821	6.40000000
11	50	3.65100000	43.08100000	128.46000000	5.92200000	68.65300000	28.04097311	6.33000000
12	55	3.38900000	47.75400000	128.56000000	7.94800000	68.63300000	30.37893648	6.36000000
13	60	3.05400000	52.42000000	128.67000000	8.86900000	68.85300000	32.80212403	6.30000000
14	65	2.73000000	57.08300000	128.79000000	5.86900000	68.45300000	34.58950202	6.27000000
15	70	2.38900000	61.79600000	128.86000000	5.56800000	68.75600000	34.58950202	6.41000000
16	75	2.07900000	66.44800000	128.89000000	5.70600000	67.85800000	35.80950022	6.30000000
17	80	1.75400000	71.13300000	128.85000000	5.98300000	68.15800000	39.47091365	6.27000000
18	85	1.42900000	75.81200000	128.89000000	5.03200000	68.88000000	39.68825620	6.43000000
19	90	1.12700000	80.50600000	128.04000000	6.80500000	68.55800000	40.84507042	6.48000000
20	95	0.78400000	85.18800000	128.13000000	8.40800000	68.59800000	42.86714788	6.52000000
21	100	0.52900000	82.39400000	128.07000000	8.36200000	68.69800000	45.12789000	6.72000000

Figura 26 – Estrutura da base de dados (Trecho 1).

	O	P	Q	R	S	T	U	V	W	X	Y
1	TC(デューリン法)	TN(ケルダール法)	304.47	310.684	317.502	324.022	330.546	337.071	343.601	350.132	356.666
2	2.39448600	0.23280000	0.06279	0.04341	0.04984	0.02552	1.03221	1.21979	1.41524	1.49774	1.55219
3	2.69743000	0.25750000	0.08162	0.04638	0.04792	0.03808	0.90345	1.06001	1.16305	1.40143	1.61073
4	2.83726200	0.27120000	0.06963	1.08297	0.87202	0.06776	1.01583	1.04542	1.44311	1.64281	1.64076
5	2.79065400	0.25420000	0.91342	1.14869	1.22087	0.8999	0.80123	1.18086	0.83206	1.40386	1.62769
6	2.11550400	0.25040000	0.90286	1.04168	1.02431	0.92788	0.98311	1.14934	1.20416	1.59434	1.62214
7	2.56926600	0.25040000	0.58213	1.05016	0.87808	1.15891	1.03908	1.23098	1.02959	1.35337	1.62429
8	2.41779000	0.22840000	0.52514	0.70353	1.13193	0.91958	0.92242	1.30413	1.72214	1.70861	1.6157
9	2.39448600	0.23170000	1.22298	1.17734	0.91816	0.93482	0.84172	0.70318	0.70032	1.41207	1.58989
10	2.61587400	0.23390000	1.09862	0.93834	1.15081	1.01862	0.73924	1.37138	1.59779	1.59212	1.58
11	2.45274600	0.22350000	1.30688	1.02898	0.92264	0.94883	1.03115	1.39142	1.47183	1.72428	1.65888
12	2.45274600	0.22240000	1.39809	1.18893	0.80791	0.88742	1.00814	1.1723	1.3041	1.61954	1.62506
13	2.51100600	0.25420000	0.4738	0.70323	0.99589	0.96115	1.02293	1.06547	1.39847	1.79985	1.70433
14	2.70909000	0.23170000	0.99032	1.35941	1.00933	1.25282	0.55839	1.18708	1.33319	1.576	1.60263
15	2.62752600	0.25810000	0.63597	0.80055	1.10936	1.12793	1.34911	1.71418	1.70288	1.70501	1.72151
16	2.46439800	0.25970000	1.3922	0.71245	1.69871	1.3414	0.86599	1.65228	0.93822	1.60445	1.71958
17	2.72074200	0.26630000	1.07375	0.98808	1.04946	1.18878	1.17437	1.40711	1.42841	1.99884	1.69647
18	2.72074200	0.28060000	1.22715	1.09062	0.71785	0.82375	1.44332	1.37392	1.32139	1.52698	1.60272
19	2.63917800	0.27670000	0.4345	0.79359	1.32929	0.78584	0.75088	1.42394	1.6814	1.88895	1.70496
20	2.35953000	0.28330000	1.01173	0.83141	0.99595	1.18741	1.00226	1.52837	0.77348	1.22973	1.53425
21	2.27796600	0.27340000	1.08925	1.09209	1.02287	1.06307	0.95525	1.54724	1.44197	1.50686	1.5705

Figura 27 – Estrutura da base de dados (Trecho 2).

APÊNDICE B – *SOFTWARES* DESENVOLVIDOS NO MATLAB

Esta seção apresenta os *softwares* desenvolvidos no MATLAB que foram utilizados para treinamento e validação das redes neurais apresentadas neste trabalho.

B.1 Método 1 – Treinamento com Única Interrupção sem Tratamento Derivativo

```
clear all;
clc;

%Solicita dados de entrada
propriedade = 0;
while ((propriedade ~= 1) & (propriedade ~= 2))
    propriedade = input('Digite a propriedade de solo que deseja estimar (1=TN / 2=MC): ');
end

rna = 0;
while ((rna ~= 1) & (rna ~= 2))
    rna = input('Digite o tipo de rede neural que deseja utilizar (1=PMC / 2=RBF): ');
end

erro_tr = 0;
while (erro_tr <= 0)
    erro_tr = input('Digite o erro máximo para o treinamento da rede: ');
end

if (rna == 1)
    camadas = 0;
    while ((camadas ~= 1) & (camadas ~= 2))
        camadas = input('Digite o número de camadas escondidas (1 ou 2): ');
    end
    if (camadas == 1)
        n_neuronios_1 = 0;
        while (n_neuronios_1 <= 0)
            n_neuronios_1 = input('Digite o número de neurônios da camada escondida: ');
        end
    else
        n_neuronios_1 = 0;
        n_neuronios_2 = 0;
        while (n_neuronios_1 <= 0)
            n_neuronios_1 = input('Digite o número de neurônios da camada escondida 1: ');
        end
        while (n_neuronios_2 <= 0)
            n_neuronios_2 = input('Digite o número de neurônios da camada escondida 2: ');
        end
    end
end
else
    spread = 0;
    while (spread <= 0)
```

```

        spread = input('Digite o valor do spread da função de base
radial:');
    end
end

%Comprimentos de onda - faixa total (304 nm a 1695 nm)
comp = xlsread('Data_Spectro',1,'Q1:IF1');

%Absorbâncias
%Busca todas as Absorbâncias - planilha 2005
x1 = xlsread('Data_Spectro',1,'Q2:IF116');
%Busca todas as Absorbâncias - planilha 2006
x2 = xlsread('Data_Spectro',2,'O2:ID184');
%Agrupa os dados - total = 298 amostras
aux = [x1;x2];

figure;
plot(comp,aux);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda
(Original)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%Comprimentos de onda - descarte dos extremos (500 nm a 1650 nm)
comp = xlsread('Data_Spectro',1,'AU1:HX1');

%Absorbâncias
%Busca todas as Absorbâncias úteis - planilha 2005
x1 = xlsread('Data_Spectro',1,'AU2:HX116');
%Busca todas as Absorbâncias úteis - planilha 2006
x2 = xlsread('Data_Spectro',2,'AS2:HV184');
%Agrupa os dados - total = 298 amostras
aux = [x1;x2];

%Faz o smoothing de todas as amostras
%pelo método de Savitzky-Golay de terceira ordem
degree=3;
xx1=[];
for i=1:size(aux,1)
    xx1=[xx1;smooth(aux(i,:), 'sgolay',degree)'];
end

%Considera a faixa 625nm a 1585 nm para utilização após o smooth
comp1 = comp(20:175);
xx = xx1(:,20:175);
aux1 = aux(:,20:175);

figure;
plot(comp,aux);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Útil)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

figure;
plot(comp1,xx);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda
(Smooth)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%normaliza todas as Absorbâncias no intervalo [-1,+1]
maximo_xx = max(max(xx));
minimo_xx = min(min(xx));

for i=1:size(xx,1)

```

```

        for j=1:size(xx,2)
            xxn(i,j) = -1 + (2*((xx(i,j)-minimo_xx)/(maximo_xx-minimo_xx)));
        end
    end

    %gera 298 inteiros aleatórios distintos no intervalo [1,298]
    permut = randperm(298);

    %Considerando 80% da massa de dados para treinamento da rede,
    %teremos 238 amostras para treinamento e 60 para validação
    %Então, dentro do conjunto normalizado, serão buscadas 238 amostras
    %aleatórias do total de amostras
    %para montar o conjunto de treinamento aleatório
    xn=[];
    for i=1:238
        xn=[xn;xxn(permut(i),:)];
    end

    %Monta o conjunto de validação aleatório com o restante das amostras de
    %Absorbâncias
    yn=[];
    for i=239:298
        yn=[yn;xxn(permut(i),:)];
    end

    amplitude_tr = xn';    %Treinamento
    amplitude_val = yn';    %Validação

    if (propriedade == 1)
        %Nitrogênio total
        %Busca todo o nitrogênio total 2005
        z1 = xlsread('Data_Spectro',1,'P2:P116');
        %Busca todo o nitrogênio total 2006
        z2 = xlsread('Data_Spectro',2,'N2:N184');

    else
        %Umidade
        %Busca toda a umidade 2005
        z1 = xlsread('Data_Spectro',1,'J2:J116');
        %Busca toda a umidade 2006
        z2 = xlsread('Data_Spectro',2,'H2:H184');
    end

    %Agrupar os dados
    z = [z1 z2];

    %Normaliza os dados no intervalo [-1,+1]
    maximo_z = max(z);
    minimo_z = min(z);

    for i=1:size(z,2)
        zn(i) = -1 + (2*((z(i)-minimo_z)/(maximo_z-minimo_z)));
    end

    %Monta o conjunto de treinamento baseado nas amostras aleatórias utilizadas
    tn_tr=[];
    for i=1:238
        tn_tr=[tn_tr zn(permut(i))];
    end

```

```

    %Monta o conjunto de validação aleatório com o restante das amostras
    tn_val=[];
    for i=239:298
        tn_val=[tn_val zn(permut(i))];
    end

    if (rna == 1)
        %Cria rede neural PMC
        %Camada(s) escondida(s) = função de ativação = tangente hiperbólica
        sigmoidal
        %Camada saída = função de ativação = linear
        if (camadas == 1)
            net =
newff(minmax(amplitude_tr),[n_neuronios_1,1],{'tansig','satlins'},'trainlm'
);
        else
            net =
newff(minmax(amplitude_tr),[n_neuronios_1,n_neuronios_2,1],{'tansig','tansi
g','satlins'},'trainlm');
        end
        %Parâmetros de treinamento Levenberg-Maquardt
        %Demais = default
        net.trainParam.show = 10;
        net.trainParam.epochs = 500;
        net.trainParam.goal = erro_tr;
        tic
        %Treina a rede PMC
        [net,tr] = train(net,amplitude_tr,tn_tr);
        toc
    else
        %Cria rede neural RBF
        eg = erro_tr;          %erro máximo de treinamento
        sc = spread;          %spread da função de base radial
        nmax = length(amplitude_tr); %número máximo de neurônios
        df = 1;              %passo de incremento no número de neurônios para
exibição na tela
        tic
        %Monta a rede RBF
        net = newrb(amplitude_tr,tn_tr,eg,sc,nmax,df);
        toc
    end

    %Simula a rede treinada para as entradas de amplitude do treinamento
    %para verificar qualidade do treinamento
    saida_tr = sim(net,amplitude_tr);

    %Valida a rede
    saida_val = sim(net,amplitude_val);

    %Prepara apresentação das informações
    if (propriedade == 1)
        out1 = ['TN real (treinamento) versus TN estimado (treinamento)'];
        out2 = ['TN'];
        out3 = ['Regressão Linear - TN (treinamento)'];
        out4 = ['TN real (validação) versus TN estimado (validação)'];
        out5 = ['Regressão Linear - TN (validação)'];
    else
        out1 = ['MC real (treinamento) versus MC estimado (treinamento)'];
        out2 = ['MC'];
        out3 = ['Regressão Linear - MC (treinamento)'];
        out4 = ['MC real (validação) versus MC estimado (validação)'];
    end

```

```

    out5 = ['Regressão Linear - MC (validação)'];
end

%Plota resultados
figure;
plot(1:length(tn_tr),tn_tr,'r',1:length(saida_tr),saida_tr,'b');grid;title(
out1);
ylabel(out2);xlabel('Amostras');
set(legend('Real','Estimado',2),'Interpreter','none');

figure;
[m,b,R_TR] = postreg(saida_tr,tn_tr);grid;title(out3);
ylabel('Estimado');xlabel('Real');
R2_TR = R_TR^2 %R² de treinamento

figure;
plot(1:length(tn_val),tn_val,'r',1:length(saida_val),saida_val,'b');grid;ti
tle(out4);
ylabel(out2);xlabel('Amostras');
set(legend('Real','Estimado',2),'Interpreter','none');

figure;
[m,b,R_VAL] = postreg(tn_val,saida_val);grid;title(out5);
ylabel('Estimado');xlabel('Real');
R2_VAL = R_VAL^2 %R² de treinamento

%Cálculo do RMSE de validação
Estimado=[];
for i=1:size(saida_val,2)
    Estimado(i) = 0.5*((saida_val(i)*(maximo_z-
minimo_z))+(maximo_z+minimo_z));
end

Real=[];
for i=239:298
    Real=[Real z(permut(i))];
end

PRESS = sum((Real(:)-Estimado(:)).^2);

soma = 0;
for i=1:numel(Real)
    soma = soma + Real(i)^2;
end

RMSE = sqrt(PRESS/numel(Real))

```

B.2 Método 2 – Treinamento com Única Interrupção e Tratamento Derivativo

```

clear all;
clc;

%Solicita dados de entrada
propriedade = 0;
while ((propriedade ~= 1) & (propriedade ~= 2))

```

```

    propriedade = input('Digite a propriedade de solo que deseja estimar
(1=TN / 2=MC):');
end

rna = 0;
while ((rna ~= 1) & (rna ~= 2))
    rna = input('Digite o tipo de rede neural que deseja utilizar (1=PMC /
2=RBF):');
end

erro_tr = 0;
while (erro_tr <= 0)
    erro_tr = input('Digite o erro máximo para o treinamento da rede:');
end

if (rna == 1)
    camadas = 0;
    while ((camadas ~= 1) & (camadas ~= 2))
        camadas = input('Digite o número de camadas escondidas (1 ou 2):');
    end
    if (camadas == 1)
        n_neuronios_1 = 0;
        while (n_neuronios_1 <= 0)
            n_neuronios_1 = input('Digite o número de neurônios da camada
escondida:');
        end
    else
        n_neuronios_1 = 0;
        n_neuronios_2 = 0;
        while (n_neuronios_1 <= 0)
            n_neuronios_1 = input('Digite o número de neurônios da camada
escondida 1:');
        end
        while (n_neuronios_2 <= 0)
            n_neuronios_2 = input('Digite o número de neurônios da camada
escondida 2:');
        end
    end
else
    spread = 0;
    while (spread <= 0)
        spread = input('Digite o valor do spread da função de base radi-
al:');
    end
end

%Comprimentos de onda - faixa total (304 nm a 1695 nm)
x = xlsread('Data_Spectro',1,'Q1:IF1');
%Absorbâncias
aux1 = xlsread('Data_Spectro',1,'Q2:IF116');
aux2 = xlsread('Data_Spectro',2,'O2:ID184');
aux = [aux1;aux2];

figure;
plot(x,aux);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Origini-
nal)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%Comprimentos de onda (500 nm a 1650 nm)
x = xlsread('Data_Spectro',1,'A1:H1');

```

```

%Absorbâncias
aux1 = xlsread('Data_Spectro',1,'AU2:HX116');
aux2 = xlsread('Data_Spectro',2,'AS2:HV184');
aux = [aux1;aux2];

%Faz o smoothing de todas as amostras
%pelo método de Savitzky-Golay de terceira ordem
degree=3;
y=[];
for i=1:size(aux,1)
    y=[y;smooth(aux(i,:), 'sgolay',degree)'];
end
figure;
plot(x,aux);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Útil)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%Considera a faixa 625nm a 1585 nm para tratamento de segunda derivada
x1 = x(20:175);
y1 = y(:,20:175);

figure;
plot(x1,y1);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Smooth)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

[l,c] = size(y1);
delta = x1(2)-x1(1);

%Derivada primeira
for i = 1:l
    d(i,1)=(1/delta)*(y1(i,2)-y1(i,1));
    d(i,c)=(1/delta)*(y1(i,c)-y1(i,c-1));
    for j = 2:c-1;
        d(i,j)=(1/(2*delta))*(y1(i,j+1)-y1(i,j-1));
    end
end

%Exibe informações
figure;
plot(x1,d);grid;title('Derivada Primeira versus Comprimento de Onda');
ylabel('Derivada Primeira');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%Derivada segunda
for i = 1:l
    for j = 2:c-1;
        dd(i,j)=(1/(delta^2))*(y1(i,j+1) - 2.*y1(i,j) + y1(i,j-1));
    end
    dd(i,1)=dd(i,2);
    dd(i,c)=dd(i,c-1);
end

%Exibe informações
figure;
plot(x1,dd);grid;title('Derivada Segunda versus Comprimento de Onda');
ylabel('Derivada Segunda');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

maximo_dd = max(max(dd));
minimo_dd = min(min(dd));

%Normaliza os dados no intervalo [-1,1]

```

```

for i=1:size(dd,1)
    for j=1:size(dd,2)
        ddn(i,j) = -1 + (2*((dd(i,j)-minimo_dd)/(maximo_dd-minimo_dd)));
    end
end

%Exibe informações
figure;
plot(x1,ddn);grid;title('Segunda Derivada versus Comprimentos de Onda (Normalizado em [-1,+1])');

%Gera 298 inteiros aleatórios distintos no intervalo [1,298]
permut = randperm(298);

%Considerando 80% da massa de dados para treinamento da rede,
%teremos 238 amostras para treinamento e 60 para validação
%então serão buscadas 238 amostras aleatórias do total de amostras
%para montar o conjunto de treinamento aleatório
xa=[];
for i=1:238
    xa=[xa;ddn(permut(i),:)];
end

%Monta o conjunto de validação aleatório com o restante das amostras de amplitude
xb=[];
for i=239:298
    xb=[xb;ddn(permut(i),:)];
end

amplitude_tr = xa';      %treinamento
amplitude_val = xb';     %validação

if (propriedade == 1)
    %Nitrogênio total
    %Busca todo o nitrogênio total 2005
    z1 = xlsread('Data_Spectro',1,'P2:P116');
    %Busca todo o nitrogênio total 2006
    z2 = xlsread('Data_Spectro',2,'N2:N184');

else
    %Umidade
    %Busca toda a umidade 2005
    z1 = xlsread('Data_Spectro',1,'J2:J116');
    %Busca toda a umidade 2006
    z2 = xlsread('Data_Spectro',2,'H2:H184');
end

%Agrupa os dados
z = [z1 z2];

%Normaliza todos os dados no intervalo [-1,+1]
maximo_z = max(z);
minimo_z = min(z);

for i=1:size(z,2)
    zn(i) = -1 + (2*((z(i)-minimo_z)/(maximo_z-minimo_z)));
end

```

```

%Monta o conjunto de treinamento baseado nas amostras aleatórias utilizadas
tn_tr=[];
for i=1:238
    tn_tr=[tn_tr zn(permut(i))];
end

%Monta o conjunto de validação aleatório com o restante das amostras
tn_val=[];
for i=239:298
    tn_val=[tn_val zn(permut(i))];
end

if (rna == 1)
    %Cria rede neural PMC
    %Camada(s) escondida(s) = função de ativação = tangente hiperbólica
    sigmoidal
    %Camada saída = função de ativação = linear
    if (camadas == 1)
        net =
newff(minmax(amplitude_tr),[n_neuronios_1,1],{'tansig','satlins'},'trainlm'
);
    else
        net =
newff(minmax(amplitude_tr),[n_neuronios_1,n_neuronios_2,1],{'tansig','tansi
g','satlins'},'trainlm');
    end
    %Parâmetros de treinamento Levenberg-Maquardt
    %Demais = default
    net.trainParam.show = 10;
    net.trainParam.epochs = 500;
    net.trainParam.goal = erro_tr;
    tic
    %Treina a rede PMC
    [net,tr] = train(net,amplitude_tr,tn_tr);
    toc
else
    %Cria rede neural RBF
    eg = erro_tr; %erro máximo de treinamento
    sc = spread; %spread da função de base radial
    nmax = length(amplitude_tr); %número máximo de neurônios
    df = 1; %passo de incremento no número de neurônios para exibi-
ção na tela
    tic
    %Monta a rede RBF
    net = newrb(amplitude_tr,tn_tr,eg,sc,nmax,df);
    toc
end

%Simula a rede treinada para as entradas de amplitude do treinamento
%para verificar qualidade do treinamento
saida_tr = sim(net,amplitude_tr);

%Valida a rede
saida_val = sim(net,amplitude_val);

%Prepara apresentação das informações
if (propriedade == 1)
    out1 = ['TN real (treinamento) versus TN estimado (treinamento)'];
    out2 = ['TN'];
    out3 = ['Regressão Linear - TN (treinamento)'];

```

```

        out4 = ['TN real (validação) versus TN estimado (validação)'];
        out5 = ['Regressão Linear - TN (validação)'];
    else
        out1 = ['MC real (treinamento) versus MC estimado (treinamento)'];
        out2 = ['MC'];
        out3 = ['Regressão Linear - MC (treinamento)'];
        out4 = ['MC real (validação) versus MC estimado (validação)'];
        out5 = ['Regressão Linear - MC (validação)'];
    end

    %Plota resultados
    figure;
    plot(1:length(tn_tr),tn_tr,'r',1:length(saida_tr),saida_tr,'b');grid;title(
    out1);
    ylabel(out2);xlabel('Amostras');
    set(legend('Real','Estimado',2),'Interpreter','none');

    figure;
    [m,b,R_TR] = postreg(saida_tr,tn_tr);grid;title(out3);
    ylabel('Estimado');xlabel('Real');
    R2_TR = R_TR^2 %R² de treinamento

    figure;
    plot(1:length(tn_val),tn_val,'r',1:length(saida_val),saida_val,'b');grid;ti
    tle(out4);
    ylabel(out2);xlabel('Amostras');
    set(legend('Real','Estimado',2),'Interpreter','none');

    figure;
    [m,b,R_VAL] = postreg(tn_val,saida_val);grid;title(out5);
    ylabel('Estimado');xlabel('Real');
    R2_VAL = R_VAL^2 %R² de treinamento

    %Cálculo do RMSE de validação
    Estimado=[];
    for i=1:size(saida_val,2)
        Estimado(i) = 0.5*((saida_val(i)*(maximo_z-
        minimo_z))+(maximo_z+minimo_z));
    end

    Real=[];
    for i=239:298
        Real=[Real z(permut(i))];
    end

    PRESS = sum((Real(:)-Estimado(:)).^2);

    soma = 0;
    for i=1:numel(Real)
        soma = soma + Real(i)^2;
    end

    RMSE = sqrt(PRESS/numel(Real))

```

B.3 Método 3 – Treinamento com Várias Interrupções sem Tratamento Derivativo

```

clear all;
clc;

R2MAX = 0;
vet_r2 = [];
vet_rmse = [];

%Solicita dados de entrada
propriedade = 0;
while ((propriedade ~= 1) & (propriedade ~= 2))
    propriedade = input('Digite a propriedade de solo que deseja estimar (1=TN / 2=MC):');
end

rna = 2;
while ((rna ~= 1) & (rna ~= 2))
    rna = input('Digite o tipo de rede neural que deseja utilizar (1=PMC / 2=RBF):');
end

erro_tr = 1E-12;

if (rna == 1)
    camadas = 0;
    while ((camadas ~= 1) & (camadas ~= 2))
        camadas = input('Digite o número de camadas escondidas (1 ou 2):');
    end
    if (camadas == 1)
        n_neuronios_1 = 0;
        while (n_neuronios_1 <= 0)
            n_neuronios_1 = input('Digite o número de neurônios da camada escondida:');
        end
    else
        n_neuronios_1 = 0;
        n_neuronios_2 = 0;
        while (n_neuronios_1 <= 0)
            n_neuronios_1 = input('Digite o número de neurônios da camada escondida 1:');
        end
        while (n_neuronios_2 <= 0)
            n_neuronios_2 = input('Digite o número de neurônios da camada escondida 2:');
        end
    end
else
    spread = 0;
    while (spread <= 0)
        spread = input('Digite o valor do spread da função de base radial:');
    end
end

%Comprimentos de onda - faixa total (304 nm a 1695 nm)
comp = xlsread('Data_Spectro',1,'Q1:IF1');
```

```

%Absorbâncias
%Busca todas as Absorbâncias - planilha 2005
x1 = xlsread('Data_Spectro',1,'Q2:IF116');
%Busca todas as Absorbâncias - planilha 2006
x2 = xlsread('Data_Spectro',2,'O2:ID184');
%Agrupa os dados - total = 298 amostras
aux = [x1;x2];

figure;
plot(comp,aux);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Original)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%Comprimentos de onda - descarte dos extremos (500 nm a 1650 nm)
comp = xlsread('Data_Spectro',1,'AU1:HX1');

%Absorbâncias
%Busca todas as Absorbâncias úteis - planilha 2005
x1 = xlsread('Data_Spectro',1,'AU2:HX116');
%Busca todas as Absorbâncias úteis - planilha 2006
x2 = xlsread('Data_Spectro',2,'AS2:HV184');
%Agrupa os dados - total = 298 amostras
aux = [x1;x2];

%Faz o smoothing de todas as amostras
%pelo método de Savitzky-Golay de terceira ordem
degree=3;
xx1=[];
for i=1:size(aux,1)
    xx1=[xx1;smooth(aux(i,:), 'sgolay',degree)'];
end

%Considera a faixa 625nm a 1585 nm para utilização após o smooth
comp1 = comp(20:175);
xx = xx1(:,20:175);
aux1 = aux(:,20:175);

figure;
plot(comp,aux);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Útil)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

figure;
plot(comp1,xx);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Smooth)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%Normaliza todas as Absorbâncias no intervalo [-1,+1]
maximo_xx = max(max(xx));
minimo_xx = min(min(xx));

for i=1:size(xx,1)
    for j=1:size(xx,2)
        xxn(i,j) = -1 + (2*((xx(i,j)-minimo_xx)/(maximo_xx-minimo_xx)));
    end
end

%Gera 298 inteiros aleatórios distintos no intervalo [1,298]
permut = randperm(298);

```

```

%Considerando 80% da massa de dados para treinamento da rede,
%teremos 238 amostras para treinamento e 60 para validação
%Então, dentro do conjunto normalizado, serão buscadas 238 amostras aleató-
rias do total de amostras
%para montar o conjunto de treinamento aleatório
xn=[];
for i=1:238
    xn=[xn;xxn(permut(i),:)];
end

%Monta o conjunto de validação aleatório com o restante das amostras de
%absorbâncias
yn=[];
for i=239:298
    yn=[yn;xxn(permut(i),:)];
end

amplitude_tr = xn';      %Treinamento
amplitude_val = yn';     %Validação

if (propriedade == 1)
    %Nitrogênio total
    %Busca todo o nitrogênio total 2005
    z1 = xlsread('Data_Spectro',1,'P2:P116');
    %Busca todo o nitrogênio total 2006
    z2 = xlsread('Data_Spectro',2,'N2:N184');
else
    %Umidade
    %Busca toda a umidade 2005
    z1 = xlsread('Data_Spectro',1,'J2:J116');
    %Busca toda a umidade 2006
    z2 = xlsread('Data_Spectro',2,'H2:H184');
end

%Agrupa os dados
z = [z1 z2];

%Normaliza os dados no intervalo [-1,+1]
maximo_z = max(z);
minimo_z = min(z);

for i=1:size(z,2)
    zn(i) = -1 + (2*((z(i)-minimo_z)/(maximo_z-minimo_z)));
end

%Monta o conjunto de treinamento baseado nas amostras aleatórias utilizadas
tn_tr=[];
for i=1:238
    tn_tr=[tn_tr zn(permut(i))];
end

%Monta o conjunto de validação aleatório com o restante das amostras
tn_val=[];
for i=239:298
    tn_val=[tn_val zn(permut(i))];
end
if (rna == 1)
    %Cria rede neural PMC

```

```

    %Camada(s) escondida(s) = função de ativação = tangente hiperbólica
    sigmoidal
    %Camada saída = função de ativação = linear
    if (camadas == 1)
        net =
newff(minmax(amplitude_tr),[n_neuronios_1,1],{'tansig','satlins'},'trainlm'
);
    else
        net =
newff(minmax(amplitude_tr),[n_neuronios_1,n_neuronios_2,1],{'tansig','tansi
g','satlins'},'trainlm');
    end
    %Parâmetros de treinamento Levenberg-Maquardt
    %Demais = default
    net.trainParam.show = 100;
    %net.trainParam.epochs = 500;
    net.trainParam.goal = erro_tr;
    Num_epoca = 5; %A cada Num_epoca interrompe o treinamento
    Repete = 20; %Repetições do processo, sendo o número máximo de épocas
    igual a Num_epoca*Repete
    %Treina a rede PMC
    tic
    for i = 1:Repete
        net.trainParam.epochs = Num_epoca;
        [net,tr] = train(net,amplitude_tr,tn_tr);
        %Valida a rede
        saida_val = sim(net,amplitude_val);

        %Calcula R²
        a=(mean(tn_val.*saida_val)- mean(tn_val)* mean(saida_val)).^2;
        b=(mean(tn_val.^2)-(mean(tn_val)).^2)*(mean(saida_val.^2)-
(mean(saida_val)).^2));
        RSQUARE=(a/b)*100;
        vet_r2 = [vet_r2 RSQUARE];

        %Calcula RMSE
        Estimado=[];
        for k=1:length(saida_val)
            Estimado(k) = 0.5*((saida_val(k)*(maximo_z-
minimo_z)))+(maximo_z+minimo_z));
        end

        Real=[];
        for k=239:298
            Real=[Real z(permut(k))];
        end

        PRESS = sum((Real(:)-Estimado(:)).^2); %Erro de previsão acumulado
        RMSE = sqrt(PRESS/numel(Real));
        vet_rmse = [vet_rmse RMSE];

        %Encontra o número de épocas ótimo - decide por R²
        if (RSQUARE > R2MAX)
            R2MAX = RSQUARE
            RMSE_RMAX = RMSE
            net_escolhida = net;
            N_otimo = Num_epoca * i;
        end
    end
end
toc

```

```

%Melhor rede:
net = net_escolhida;
N_otimo      %Número de épocas ótimo
R2MAX        %Maior correlação
RMSE_RMAX    %RMSE na correlação máxima

else
    %Cria rede neural RBF
    eg = erro_tr;          %Erro máximo de treinamento
    sc = spread;           %Spread da função de base radial
    df = 5;               %Passo de incremento no número de neurônios para
exibição na tela
    Num_epoca = 5;        %A cada Num_epoca valida a rede
    nmax = 5;
    i = 1;
    tic
    while (nmax <= length(amplitude_tr))

        %Monta e treina a rede RBF
        net = newrb(amplitude_tr,tn_tr,eg,sc,nmax,df);
        %Valida a rede
        saida_val = sim(net,amplitude_val);

        %Calcula R²
        a=(mean(tn_val.*saida_val)- mean(tn_val)* mean(saida_val)).^2;
        b=(mean(tn_val.^2)-(mean(tn_val)).^2)*(mean(saida_val.^2)-
(mean(saida_val)).^2));
        RSQUARE=(a/b)*100;
        vet_r2 = [vet_r2 RSQUARE];

        %Calcula RMSE
        Estimado=[];
        for k=1:length(saida_val)
            Estimado(k) = 0.5*((saida_val(k)*(maximo_z-
minimo_z)))+(maximo_z+minimo_z));
        end

        Real=[];
        for k=239:298
            Real=[Real z(permut(k))];
        end

        PRESS = sum((Real(:)-Estimado(:)).^2); %Erro de previsão acumulado
        RMSE = sqrt(PRESS/numel(Real));
        vet_rmse = [vet_rmse RMSE];

        %Encontra o número de épocas ótimo - decide por R²
        if (RSQUARE > R2MAX)
            R2MAX = RSQUARE
            RMSE_RMAX = RMSE
            net_escolhida = net;
            N_otimo = nmax;
        end

        i = i + 1;
        nmax = Num_epoca*i; %Atualiza número máximo de neurô-
nios (épocas);
    end
    toc
    %Melhor rede:

```

```

net = net_escolhida;
N_otimo      %Número de (neurônios)épocas ótimo
R2MAX        %Maior correlação de validação
RMSE_RMAX    %RMSE na correlação máxima de validação

end

%Simula a rede escolhida para as entradas de amplitude do treinamento
%para verificar qualidade do treinamento
saida_tr = sim(net,amplitude_tr);

%Valida a rede
saida_val = sim(net,amplitude_val);

%Prepara apresentação das informações
if (propriedade == 1)
    out1 = ['TN real (treinamento) versus TN estimado (treinamento)'];
    out2 = ['TN'];
    out3 = ['Regressão Linear - TN (treinamento)'];
    out4 = ['TN real (validação) versus TN estimado (validação)'];
    out5 = ['Regressão Linear - TN (validação)'];

    if (rna == 1)
        out6 = ['Número de épocas (x5)'];
        out7 = ['R² (TN validação) versus Número de épocas do treinamen-
to'];
        out8 = ['RMSE (TN validação) versus Número de épocas do treinamen-
to'];
    else
        out6 = ['Número de neurônios (x5)'];
        out7 = ['R² (TN validação) versus Número de neurônios da camada es-
condida'];
        out8 = ['RMSE (TN validação) versus Número de neurônios da camada
escondida'];
    end
end

else
    out1 = ['MC real (treinamento) versus MC estimado (treinamento)'];
    out2 = ['MC'];
    out3 = ['Regressão Linear - MC (treinamento)'];
    out4 = ['MC real (validação) versus MC estimado (validação)'];
    out5 = ['Regressão Linear - MC (validação)'];

    if (rna == 1)
        out6 = ['Número de épocas (x5)'];
        out7 = ['R² (MC validação) versus Número de épocas do treinamen-
to'];
        out8 = ['RMSE (MC validação) versus Número de épocas do treinamen-
to'];
    else
        out6 = ['Número de neurônios (x5)'];
        out7 = ['R² (MC validação) versus Número de neurônios da camada es-
condida'];
        out8 = ['RMSE (MC validação) versus Número de neurônios da camada
escondida'];
    end
end

%Plota resultados
figure;

```

```

plot(1:length(tn_tr),tn_tr,'r',1:length(saida_tr),saida_tr,'b');grid;title(
out1);
ylabel(out2);xlabel('Amostras');
set(legend('Real','Estimado',2),'Interpreter','none');

figure;
[m,b,R_TR] = postreg(saida_tr,tn_tr);grid;title(out3);
ylabel('Estimado');xlabel('Real');
R2_TR = R_TR^2 %R² de treinamento

figure;
plot(1:length(tn_val),tn_val,'r',1:length(saida_val),saida_val,'b');grid;ti
tle(out4);
ylabel(out2);xlabel('Amostras');
set(legend('Real','Estimado',2),'Interpreter','none');

figure;
postreg(tn_val,saida_val);grid;title(out5);
ylabel('Estimado');xlabel('Real');

figure;
plot(vet_r2);grid;
ylabel('R²');xlabel(out6);title(out7);

figure;
plot(vet_rmse);grid;
ylabel('RMSE');xlabel(out6);title(out8);

```

B.4 Método 4 – Treinamento com Várias Interrupções e Tratamento Derivativo

```

clear all;
clc;

R2MAX = 0;
vet_r2 = [];
vet_rmse = [];

%Solicita dados de entrada
propriedade = 0;
while ((propriedade ~= 1) & (propriedade ~= 2))
    propriedade = input('Digite a propriedade de solo que deseja estimar
(1=TN / 2=MC):');
end

rna = 0;
while ((rna ~= 1) & (rna ~= 2))
    rna = input('Digite o tipo de rede neural que deseja utilizar (1=PMC /
2=RBF):');
end

erro_tr = 1E-12;

if (rna == 1)
    camadas = 0;
    while ((camadas ~= 1) & (camadas ~= 2))

```

```

        camadas = input('Digite o número de camadas escondidas (1 ou 2):');
    end
    if (camadas == 1)
        n_neuronios_1 = 0;
        while (n_neuronios_1 <= 0)
            n_neuronios_1 = input('Digite o número de neurônios da camada
escondida:');
        end
    else
        n_neuronios_1 = 0;
        n_neuronios_2 = 0;
        while (n_neuronios_1 <= 0)
            n_neuronios_1 = input('Digite o número de neurônios da camada
escondida 1:');
        end
        while (n_neuronios_2 <= 0)
            n_neuronios_2 = input('Digite o número de neurônios da camada
escondida 2:');
        end
    end
else
    spread = 0;
    while (spread <= 0)
        spread = input('Digite o valor do spread da função de base radi-
al:');
    end
end

%Comprimentos de onda - faixa total (304 nm a 1695 nm)
x = xlsread('Data_Spectro',1,'Q1:IF1');
%Absorbâncias
aux1 = xlsread('Data_Spectro',1,'Q2:IF116');
aux2 = xlsread('Data_Spectro',2,'O2:ID184');
aux = [aux1;aux2];

figure;
plot(x,aux);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Origini-
nal)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%Comprimentos de onda (500 nm a 1650 nm)
x = xlsread('Data_Spectro',1,'AU1:HX1');
%refletancias
aux1 = xlsread('Data_Spectro',1,'AU2:HX116');
aux2 = xlsread('Data_Spectro',2,'AS2:HV184');
aux = [aux1;aux2];

%Faz o smoothing de todas as amostras
%pelo método de Savitzky-Golay de terceira ordem
degree=3;
y=[];
for i=1:size(aux,1)
    y=[y;smooth(aux(i,:), 'sgolay',degree)'];
end

figure;
plot(x,aux);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Útil)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%Considera a faixa 625nm a 1585 nm para tratamento de segunda derivada

```

```

x1 = x(20:175);
y1 = y(:,20:175);

figure;
plot(x1,y1);grid;title('Absorbância versus Comprimento de Onda (Smooth)');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

[l,c] = size(y1);
delta = x1(2)-x1(1);

%Derivada primeira
for i = 1:l
    d(i,1)=(1/delta)*(y1(i,2)-y1(i,1));
    d(i,c)=(1/delta)*(y1(i,c)-y1(i,c-1));
    for j = 2:c-1;
        d(i,j)=(1/(2*delta))*(y1(i,j+1)-y1(i,j-1));
    end
end

%Exibe informações
figure;
plot(x1,d);grid;title('Derivada Primeira versus Comprimento de Onda');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

%Derivada segunda
for i = 1:l
    for j = 2:c-1;
        dd(i,j)=(1/(delta^2))*(y1(i,j+1) - 2.*y1(i,j) + y1(i,j-1));
    end
    dd(i,1)=dd(i,2);
    dd(i,c)=dd(i,c-1);
end

%Exibe informações
figure;
plot(x1,dd);grid;title('Derivada Segunda versus Comprimento de Onda');
ylabel('Absorbância');xlabel('Comprimento de onda (nm)');

maximo_dd = max(max(dd));
minimo_dd = min(min(dd));

%Normaliza os dados no intervalo [-1,1]
for i=1:size(dd,1)
    for j=1:size(dd,2)
        ddn(i,j) = -1 + (2*((dd(i,j)-minimo_dd)/(maximo_dd-minimo_dd)));
    end
end

%Exibe informações
figure;
plot(x1,ddn);grid;title('Segunda Derivada versus Comprimentos de Onda (Normalizado em [-1,+1])');

%Gera 298 inteiros aleatórios distintos no intervalo [1,298]
permut = randperm(298);

%Considerando 80% da massa de dados para treinamento da rede,
%teremos 238 amostras para treinamento e 60 para validação
%então serão buscadas 238 amostras aleatórias do total de amostras

```

```

%para montar o conjunto de treinamento aleatório
xa=[];
for i=1:238
    xa=[xa;ddn(permut(i),:)]];
end

%Monta o conjunto de validação aleatório com o restante das amostras de am-
plitude
xb=[];
for i=239:298
    xb=[xb;ddn(permut(i),:)]];
end

amplitude_tr = xa';      %Treinamento
amplitude_val = xb';      %Validação

if (propriedade == 1)
    %Nitrogênio total
    %Busca todo o nitrogênio total 2005
    z1 = xlsread('Data_Spectro',1,'P2:P116');
    %Busca todo o nitrogênio total 2006
    z2 = xlsread('Data_Spectro',2,'N2:N184');

else
    %Umidade
    %Busca toda a umidade 2005
    z1 = xlsread('Data_Spectro',1,'J2:J116');
    %Busca toda a umidade 2006
    z2 = xlsread('Data_Spectro',2,'H2:H184');
end

%Agrupa os dados
z = [z1 z2];

%Normaliza todos os dados no intervalo [-1,+1]
maximo_z = max(z);
minimo_z = min(z);

for i=1:size(z,2)
    zn(i) = -1 + (2*((z(i)-minimo_z)/(maximo_z-minimo_z)));
end

%Monta o conjunto de treinamento baseado nas amostras aleatórias utilizadas
tn_tr=[];
for i=1:238
    tn_tr=[tn_tr zn(permut(i))];
end

%Monta o conjunto de validação aleatório com o restante das amostras
tn_val=[];
for i=239:298
    tn_val=[tn_val zn(permut(i))];
end

if (rna == 1)
    %Cria rede neural PMC
    %Camada(s) escondida(s) = função de ativação = tangente hiperbólica
    sigmoidal
    %Camada saída = função de ativação = linear

```

```

    if (camadas == 1)
        net =
newff(minmax(amplitude_tr),[n_neuronios_1,1],{'tansig','satlins'},'trainlm'
);
    else
        net =
newff(minmax(amplitude_tr),[n_neuronios_1,n_neuronios_2,1],{'tansig','tansi
g','satlins'},'trainlm');
    end
    %Parâmetros de treinamento Levenberg-Maquardt
    %Demaís = default
    net.trainParam.show = 100;
    %net.trainParam.epochs = 500;
    net.trainParam.goal = erro_tr;
    Num_epoca = 5; %A cada Num_epoca interrompe o treinamento
    Repete = 20; %Repetições do processo, sendo o número máximo de épocas
igual a Num_epoca*Repete
    %Treina a rede PMC
    tic
    for i = 1:Repete
        net.trainParam.epochs = Num_epoca;
        [net,tr] = train(net,amplitude_tr,tn_tr);
        %Valida a rede
        saida_val = sim(net,amplitude_val);

        %Calcula R²
        a=(mean(tn_val.*saida_val)- mean(tn_val)* mean(saida_val)).^2;
        b=(mean(tn_val.^2)-(mean(tn_val)).^2)*(mean(saida_val.^2)-
(mean(saida_val)).^2));
        RSQUARE=(a/b)*100;
        vet_r2 = [vet_r2 RSQUARE];

        %Calcula RMSE
        Estimado=[];
        for k=1:length(saida_val)
            Estimado(k) = 0.5*((saida_val(k)*(maximo_z-
minimo_z)))+(maximo_z+minimo_z));
        end

        Real=[];
        for k=239:298
            Real=[Real z(permut(k))];
        end

        PRESS = sum((Real(:)-Estimado(:)).^2); %Erro de previsão acumulado
        RMSE = sqrt(PRESS/numel(Real));
        vet_rmse = [vet_rmse RMSE];

        %Encontra o número de épocas ótimo - decide por R²
        if (RSQUARE > R2MAX)
            R2MAX = RSQUARE
            RMSE_RMAX = RMSE
            net_escolhida = net;
            N_otimo = Num_epoca * i;
        end
    end
    toc
    %Melhor rede:
    net = net_escolhida;
    N_otimo %Número de épocas ótimo

```

```

R2MAX          %Maior correlação
RMSE_RMAX      %RMSE na correlação máxima

else
    %Cria rede neural RBF
    eg = erro_tr;          %Erro máximo de treinamento
    sc = spread;          %Spread da função de base radial
    df = 5;              %Passo de incremento no número de neurônios para
exibição na tela
    Num_epoca = 5;        %A cada Num_epoca valida a rede
    nmax = 5;
    i = 1;
    tic
    while (nmax <= length(amplitude_tr))

        %Monta e treina a rede RBF
        net = newrb(amplitude_tr,tn_tr,eg,sc,nmax,df);
        %Valida a rede
        saida_val = sim(net,amplitude_val);

        %Calcula R²
        a=(mean(tn_val.*saida_val)- mean(tn_val)* mean(saida_val)).^2;
        b=(mean(tn_val.^2)-(mean(tn_val)).^2)*(mean(saida_val.^2)-
(mean(saida_val)).^2));
        RSQUARE=(a/b)*100;
        vet_r2 = [vet_r2 RSQUARE];

        %Calcula RMSE
        Estimado=[];
        for k=1:length(saida_val)
            Estimado(k) = 0.5*((saida_val(k)*(maximo_z-
minimo_z)))+(maximo_z+minimo_z));
        end

        Real=[];
        for k=239:298
            Real=[Real z(permut(k))];
        end

        PRESS = sum((Real(:)-Estimado(:)).^2); %Erro de previsão acumulado
        RMSE = sqrt(PRESS/numel(Real));
        vet_rmse = [vet_rmse RMSE];

        %Encontra o número de épocas ótimo - decide por R²
        if (RSQUARE > R2MAX)
            R2MAX = RSQUARE
            RMSE_RMAX = RMSE
            net_escolhida = net;
            N_otimo = nmax;
        end

        i = i + 1;
        nmax = Num_epoca*i; %Atualiza número máximo de neurô-
nios(épocas);
    end
    toc
    % Melhor rede:
    net = net_escolhida;
    N_otimo %Número de (neurônios)épocas ótimo
    R2MAX %Maior correlação de validação

```

```

    RMSE_RMAX    %RMSE na correlação máxima de validação
end

%Simula a rede treinada para as entradas de amplitude do treinamento
%para verificar qualidade do treinamento
saida_tr = sim(net,amplitude_tr);

%Valida a rede
saida_val = sim(net,amplitude_val);

%Prepara apresentação das informações
if (propriedade == 1)
    out1 = ['TN real (treinamento) versus TN estimado (treinamento)'];
    out2 = ['TN'];
    out3 = ['Regressão Linear - TN (treinamento)'];
    out4 = ['TN real (validação) versus TN estimado (validação)'];
    out5 = ['Regressão Linear - TN (validação)'];

    if (rna == 1)
        out6 = ['Número de épocas (x5)'];
        out7 = ['R² (TN validação) versus Número de épocas do treinamen-
to'];
        out8 = ['RMSE (TN validação) versus Número de épocas do treinamen-
to'];
    else
        out6 = ['Número de neurônios (x5)'];
        out7 = ['R² (TN validação) versus Número de neurônios da camada es-
condida'];
        out8 = ['RMSE (TN validação) versus Número de neurônios da camada
escondida'];
    end

else
    out1 = ['MC real (treinamento) versus MC estimado (treinamento)'];
    out2 = ['MC'];
    out3 = ['Regressão Linear - MC (treinamento)'];
    out4 = ['MC real (validação) versus MC estimado (validação)'];
    out5 = ['Regressão Linear - MC (validação)'];

    if (rna == 1)
        out6 = ['Número de épocas (x5)'];
        out7 = ['R² (MC validação) versus Número de épocas do treinamen-
to'];
        out8 = ['RMSE (MC validação) versus Número de épocas do treinamen-
to'];
    else
        out6 = ['Número de neurônios (x5)'];
        out7 = ['R² (MC validação) versus Número de neurônios da camada es-
condida'];
        out8 = ['RMSE (MC validação) versus Número de neurônios da camada
escondida'];
    end
end

%Plota resultados
figure;
plot(1:length(tn_tr),tn_tr,'r',1:length(saida_tr),saida_tr,'b');grid;title(
out1);
ylabel(out2);xlabel('Amostras');
set(legend('Real','Estimado',2),'Interpreter','none');

```

```

figure;
[m,b,R_TR] = postreg(saida_tr,tn_tr);grid;title(out3);
ylabel('Estimado');xlabel('Real');
R2_TR = R_TR^2 %R² de treinamento

figure;
plot(1:length(tn_val),tn_val,'r',1:length(saida_val),saida_val,'b');grid;title(out4);
ylabel(out2);xlabel('Amostras');
set(legend('Real','Estimado',2),'Interpreter','none');

figure;
postreg(tn_val,saida_val);grid;title(out5);
ylabel('Estimado');xlabel('Real');

figure;
plot(vet_r2);grid;
ylabel('R²');xlabel(out6);title(out7);

figure;
plot(vet_rmse);grid;
ylabel('RMSE');xlabel(out6);title(out8);

```

APÊNDICE C – REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Esta seção aprofunda os conceitos sobre redes neurais artificiais e apresenta informações mais específicas sobre os tipos de rede utilizados neste trabalho.

C.1 Modelo do Neurônio Artificial

De uma forma geral, o elemento processador de uma rede neural opera da seguinte maneira:

- a) A entrada do elemento processador recebe um conjunto de sinais;
- b) A influência de cada sinal na saída do elemento processador é indicada por um peso sináptico. Cada sinal é multiplicado por seu peso sináptico específico;
- c) Um nível de atividade para o elemento processador é produzido a partir da soma ponderada dos sinais;
- d) O elemento processador produz uma saída caso esse nível exceda um limiar de ativação (*threshold*).

Os elementos processadores simulam o funcionamento de um neurônio biológico, recebendo e retransmitindo informações.

O modelo de neurônio artificial mais simples e que engloba as principais características encontradas em uma rede neural biológica foi proposto por McCulloch e Pitts (MCCULLOCH, 1943) e está ilustrado na Figura 28.

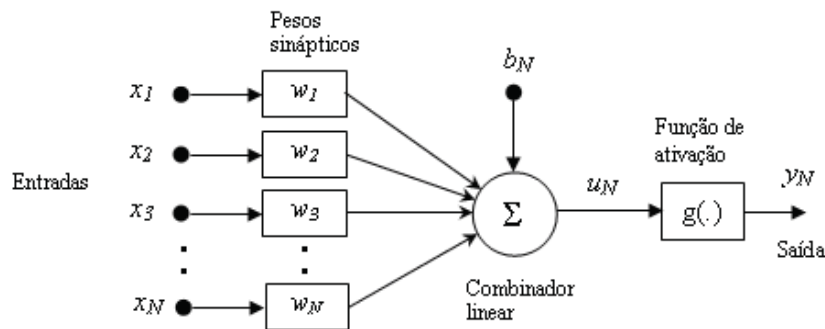


Figura 28 – Modelo do neurônio artificial.

O comportamento do neurônio artificial é descrito pelas seguintes equações:

$$u = \sum_{i=1}^N w_i \cdot x_i + b \quad (6)$$

$$y = g(u) \quad (7)$$

Onde:

$x_1, x_2, \dots, x_N$ são os sinais de entrada;

$w_1, w_2, \dots, w_N$ são os pesos sinápticos;

b_N é o limiar de ativação do neurônio;

u_N é a saída do combinador linear;

$g(u)$ é a função de ativação;

y é o sinal de saída do neurônio.

O tipo das funções de ativação depende do problema que a rede esteja tratando. Em relação ao seu funcionamento, a função de ativação $g(.)$ faz o processamento do conjunto de entradas e o transforma em um estado de ativação. Geralmente, o estado de ativação do neurônio pode assumir os seguintes valores binários (0 e 1), bipolares (-1 e +1) e reais.

As funções de ativação mais utilizadas são:

1) Função degrau

Para esse tipo de ativação, mostrado na Figura 29, tem-se:

$$g(u) = \begin{cases} 1 & \text{se } u \geq 0 \\ 0 & \text{se } u < 0 \end{cases} \quad (8)$$

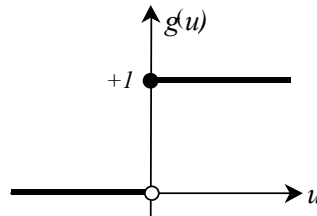


Figura 29 – Função degrau.

A saída do neurônio assumirá o valor 1 se o nível de atividade interna total do neurônio for não-negativo, caso contrário a saída do neurônio assumirá o valor 0.

2) Função degrau (bipolar)

Para esse tipo de ativação, mostrado na Figura 30, tem-se:

$$g(u) = \begin{cases} 1 & \text{se } u \geq 0 \\ -1 & \text{se } u < 0 \end{cases} \quad (9)$$

A saída do neurônio assumirá o valor 1 se o nível de atividade interna total do neurônio for não-negativo, caso contrário, a saída do neurônio assumirá o valor -1.

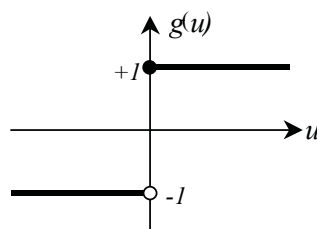


Figura 30 – Função degrau (bipolar).

3) Função rampa

Para esse tipo de ativação, mostrado na Figura 31, tem-se:

$$g(u) = \begin{cases} 1 & \text{se } u \geq a \\ u & \text{se } -a < u < a \\ -1 & \text{se } u \leq -a \end{cases} \quad (10)$$

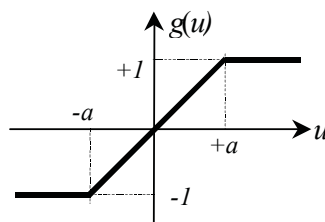


Figura 31 – Função rampa.

Para essa função de ativação, a saída do neurônio pode assumir valores positivos e negativos no domínio de -1 a 1, e no intervalo definido em $\{-a, a\}$, a saída assume o valor da função $g(u)=u$.

4) Função sigmóide

Para a função sigmóide, ilustrada na Figura 32, tem-se:

$$g(u) = \frac{1}{1 + e^{(-\beta u)}} \quad (11)$$

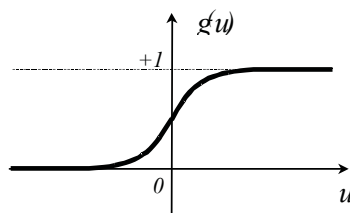


Figura 32 – Função sigmóide.

O parâmetro β define a inclinação (ganho) da função sigmóide. Nesse tipo de função, a saída do neurônio assumirá valores reais entre 0 e 1.

5) Função tangente hiperbólica

Para a função do tipo tangente hiperbólica (Figura 33), tem-se:

$$g(u) = \tanh(u) = \frac{1 - e^{-u}}{1 + e^{-u}} \quad (12)$$

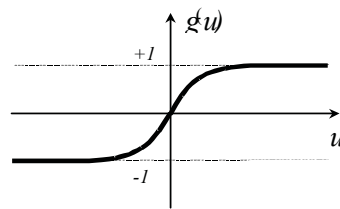


Figura 33 – Função tangente hiperbólica.

Para esta função de ativação, a saída do neurônio pode assumir valores reais (negativos e positivos) no intervalo de -1 a 1.

C.2 Topologias das Redes Neurais Artificiais

O algoritmo de aprendizagem da rede influencia a forma de interligação entre os neurônios.

A organização típica das arquiteturas neurais é na forma de camadas, com unidades que podem estar conectadas às unidades da camada posterior.

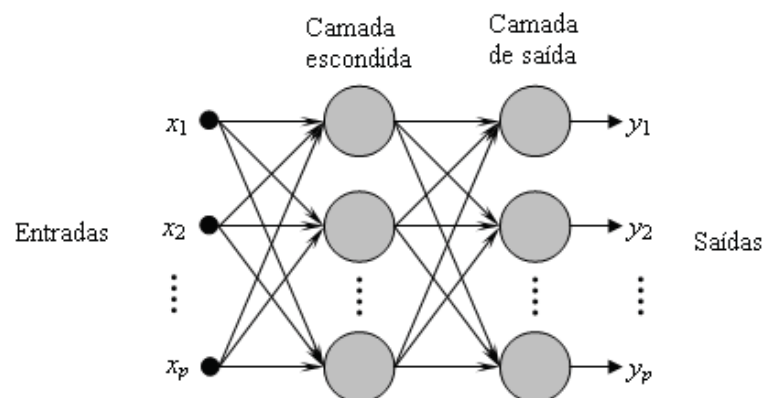


Figura 34 – Organização em camadas da rede neural artificial.

Conforme ilustrado na Figura 34, a classificação das camadas de uma rede neural é feita da seguinte forma:

- Camada de Entrada: onde ocorre a apresentação dos padrões à rede;
- Camadas Intermediárias ou Escondidas: onde é feita a maior parte do processamento. Nessas camadas ocorre a extração de características;
- Camada de Saída: onde ocorre a conclusão e apresentação do resultado final.

Redes neurais podem também ser classificadas de acordo com sua arquitetura de implementação, características de seus nós, regras de treinamento e tipos de neurônio empregados. Utilizando o ponto de vista topológico, Haykin (1999) classifica as redes neurais artificiais em três classes com arquiteturas distintas:

1) Redes alimentadas adiante com única camada (*Feedforward* - Única Camada)

São redes neurais com uma camada de entrada e uma única camada de neurônios que é a própria camada de saída (Figura 35). As principais aplicações são em memórias associativas e no reconhecimento de padrões. Como exemplos para esse tipo de rede, podem ser citados o modelo do *Perceptron* (ROSENBLATT, 1958) e o *Adaline* (WIDROW, 1962).

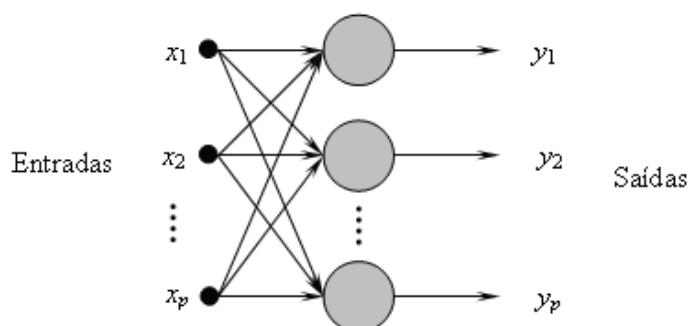


Figura 35 – Rede alimentada adiante com camada única.

2) Redes alimentadas adiante com múltiplas camadas (*Feedforward* - Multicamadas)

Esse tipo de rede difere do anterior pela presença de uma ou mais camadas escondidas de neurônios (Figura 36).

As principais aplicações são em reconhecimento de padrões, aproximador universal de funções e em controle (ANTSAKLIS, 1992; NARENDRA; PARTHASARATHY, 1990). Como exemplos para esse tipo de rede, podem ser citados o *Madaline*, o *Perceptron* Multicamadas (PMC) e o de Função Base Radial (RBF - *radial basis function*).

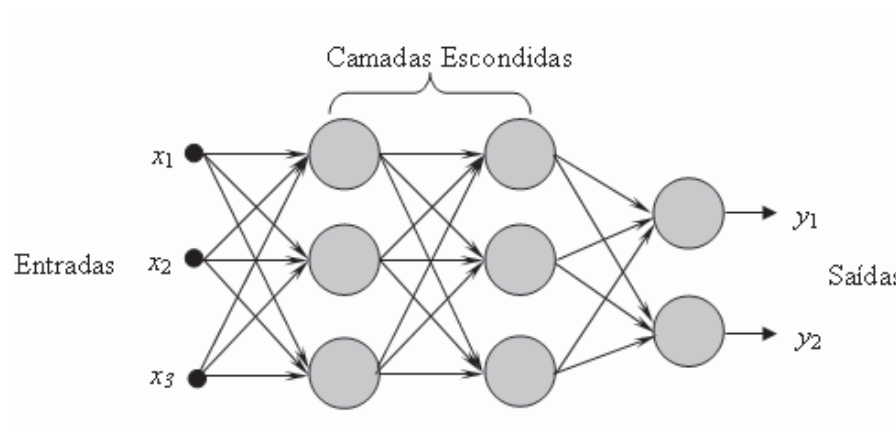


Figura 36 – Rede alimentada adiante com múltiplas camadas.

3) Redes Recorrentes

A diferença entre uma rede recorrente e uma rede neural alimentada adiante é a presença de pelo menos um laço de realimentação entre neurônios de camadas diferentes (Figura 37). As principais aplicações para esse tipo de rede são em sistemas dinâmicos, memórias associativas, previsão e estimação, otimização e no controle. Como exemplos para esse tipo de rede, podem ser citados o modelo de Hopfield e o *Perceptron* com realimentação.

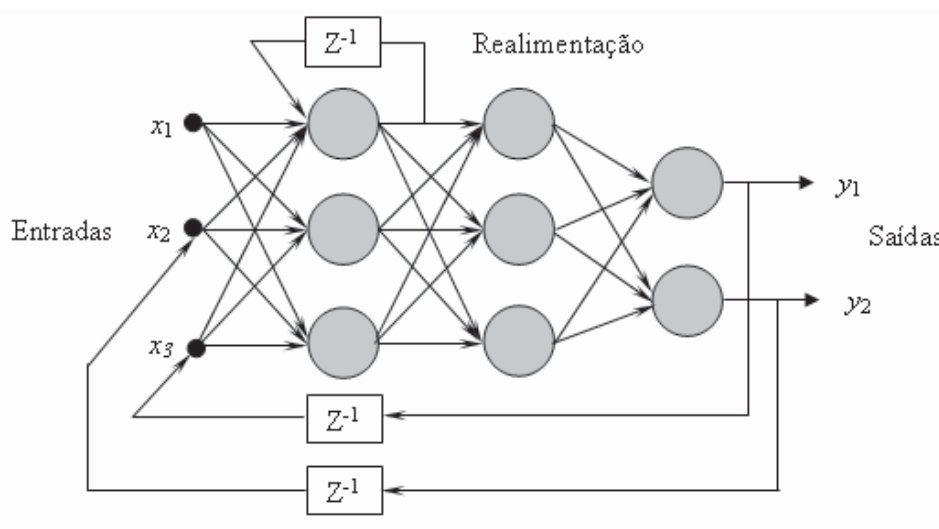


Figura 37 – Rede recorrente.

C.3 Treinamento das Redes Neurais Artificiais

C.3.1 Considerações gerais

A sistemática necessária para executar adequadamente o processo desejado a partir dos dados fornecidos é adquirida pela rede neural a partir de um processo de treinamento que utiliza casos reais conhecidos. Logo, a rede neural consegue extrair regras básicas a partir de dados reais (conhecimento implícito), o que a difere da computação convencional, onde são utilizados regras pré-fixadas e algoritmos (conhecimento explícito).

A habilidade de aprender a partir da experiência é a propriedade mais importante das redes neurais artificiais. O processo de aprendizagem ou treinamento é realizado através de um processo iterativo (algoritmo de treinamento) onde os pesos sinápticos são ajustados até que um conjunto de entradas produza um conjunto de saídas desejado (HAYKIN, 1999).

Existem diversos tipos de algoritmos de aprendizagem, sendo que uma determinada arquitetura de rede possui um tipo de algoritmo específico. A diferença entre esses algoritmos basicamente é o modo pelo qual o ajuste dos pesos sinápticos é realizado.

O treinamento pode ser classificado em duas categorias distintas:

- 1) Treinamento supervisionado

O aprendizado decorre do fornecimento de conjuntos de entrada juntamente com os respectivos conjuntos de saída. Quando um vetor de entrada é apresentado à rede, ela calcula o vetor de saída que é depois comparado com o respectivo vetor de saída que foi fornecido. O erro resultante da comparação é retropropagado na rede de forma a ajustar os pesos sinápticos e limiares de ativação utilizando algum algoritmo que minimize esse erro.

2) Treinamento não supervisionado

Neste caso, somente os conjuntos de entrada são fornecidos à rede, sendo que uma unidade de saída é treinada com o propósito de agrupar as entradas em padrões. O algoritmo de treinamento ajusta os pesos sinápticos e limiares de ativação para produzir saídas relativas a certas particularidades estatísticas encontradas nos conjuntos de treinamento. A codificação de características das entradas e a criação automática de grupos (classes) é feita pela própria rede.

C.3.2 Etapas do treinamento

O treinamento de uma rede neural artificial segue um encadeamento definido de etapas, cuja descrição vem a seguir.

✓ Etapa 1: Escolha das variáveis envolvidas

A primeira etapa envolve um estudo detalhado do problema a ser abordado onde as variáveis que afetam o comportamento do processo devem ser identificadas. A aquisição de dados somente deve ser efetuada após a verificação da viabilidade e do custo de cada variável a ser coletada.

✓ Etapa 2: Aquisição de dados

A segunda etapa envolve uma análise cuidadosa sobre o problema com o objetivo de minimizar possíveis redundâncias e erros nos dados. Além disso, a base de dados coletados deve cobrir o domínio do problema de forma ampla. A base de dados não deve cobrir apenas as operações normais ou rotineiras, mas também exceções e limites observados no processo em análise.

- ✓ Etapa 3: Separação da base de dados em conjuntos de treinamento e validação

A base de dados deve ser separada em dois conjuntos distintos: dados de treinamento, que serão utilizados no processo de treinamento da rede e dados de validação, que serão utilizados para verificar o desempenho da rede sob condições reais de utilização. Após a montagem dos dois conjuntos, uma boa prática é colocar seus dados em ordem aleatória para evitar possíveis tendências associadas à ordem de apresentação das informações. Os dados podem inclusive passar por um pré-processamento realizado através de normalizações, escalonamentos e conversões de formato para torná-los mais apropriados ao treinamento da rede neural.

- ✓ Etapa 4: Escolha da configuração da rede neural

A escolha da configuração da rede neural pode ser dividida em:

- Seleção do paradigma neural mais apropriado para o caso;
- Determinação da topologia da rede a ser utilizada (número de camadas, número de neurônios em cada camada e tipo das funções de ativação);
- Determinação de parâmetros para o algoritmo de treinamento, sendo esse passo de grande influência no desempenho do sistema resultante.

A tarefa de configuração da rede depende em grande parte da experiência particular de cada projetista.

- ✓ Etapa 5: Aprendizagem

Nessa etapa, a partir da definição do algoritmo de treinamento para o paradigma neural selecionado, os pesos sinápticos serão ajustados. Dois aspectos importantes devem ser considerados: os valores iniciais para os pesos sinápticos e limiares de ativação e o critério de parada do treinamento.

Os pesos e limiares iniciais devem ser originados a partir de uma distribuição uniforme cuja média é zero e a variância é escolhida para que o desvio padrão dos campos locais induzidos dos neurônios recaia entre as partes linear e saturada da função de ativação.

Os critérios mais utilizados para encerrar o processo de treinamento são: encerramento quando um determinado número de ciclos (épocas) de treinamento for alcançado, encerrar após o erro quadrático médio ficar abaixo de um valor pré-determinado ou uma combinação dos dois critérios anteriores.

Geralmente, o treinamento deve ser encerrado quando a rede neural apresentar uma boa generalização, ou seja, quando o mapeamento entre entradas e saídas computado pela rede for correto (ou aproximadamente correto) para os dados do conjunto de treinamento.

✓ Etapa 6: Validação

Nessa etapa a rede neural é submetida ao conjunto de dados que foi reservado para a validação, como critério para avaliação de seu desempenho, ou seja, será verificado se houve aprendizado suficiente para generalização do conhecimento adquirido durante o treinamento.

A apresentação à rede neural de todos os pares entrada/saída que fazem parte do conjunto de treinamento é denominada ciclo de aprendizado ou época do treinamento. Os ajustes dos pesos sinápticos numa determinada época do treinamento podem ser executados de dois modos.

No modo seqüencial, o ajuste é realizado a cada apresentação de um par entrada/saída do conjunto de treinamento. No modo por lotes (*batch*), o ajuste é realizado por época de treinamento.

C.4 Rede *Perceptron* Multicamadas (PMC)

Conforme apresentado na seção C.2, a rede *Perceptron* Multicamadas (PMC) é um tipo de rede que pertence ao grupo das redes alimentadas adiante com múltiplas camadas.

A seguir são apresentados dois algoritmos clássicos utilizados para o treinamento supervisionado das redes PMC.

C.4.1 Algoritmo *backpropagation*

O algoritmo *backpropagation* foi proposto por Rumelhart et al. (1986) para treinamento supervisionado de redes neurais artificiais do tipo *Perceptron* multicamadas.

O treinamento da rede ocorre a partir de dois passos descritos a seguir:

1) Passo para frente (propagação)

Um padrão de treinamento é apresentado à rede e a mesma realiza a computação, camada por camada, até que uma resposta seja produzida na saída.

2) Passo para trás (retropropagação)

A saída produzida pela rede é comparada à saída desejada para o padrão apresentado. Se a saída produzida for diferente da desejada, um erro é calculado. Esse erro é então retropropagado a partir da camada de saída até a camada de entrada, e os pesos sinápticos associados aos neurônios das camadas internas vão sendo reajustados (HAYKIN, 1999). Enquanto o erro quadrático médio das saídas não ficar abaixo de um valor aceitável, o processo de retropropagação é repetido.

O algoritmo *backpropagation* será demonstrado a seguir para uma rede PMC com apenas uma camada escondida. O raciocínio utilizado pode ser expandido para redes com duas ou mais camadas escondidas. A Figura 38 mostra o diagrama esquemático de uma rede PMC com uma camada escondida.

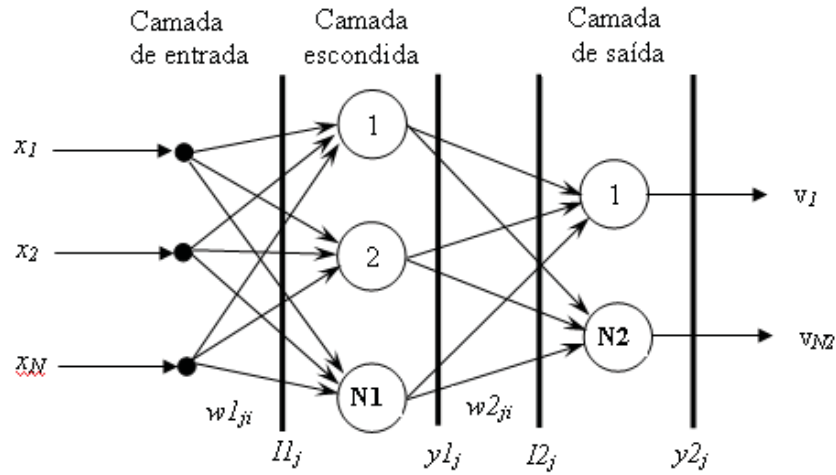


Figura 38 – Diagrama esquemático da rede *Perceptron* multicamadas.

A convenção utilizada durante a demonstração vem a seguir:

- O parâmetro N especifica o número de variáveis em cada vetor de entrada;
- O parâmetro $N1$ especifica a quantidade de neurônios na camada escondida;
- O parâmetro $N2$ especifica o número de variáveis em cada vetor de saída, e também indica a quantidade de neurônios na camada de saída;
- O vetor $x = [x_1, x_2, \dots, x_N]^T$ é o vetor de entrada da rede;
- O vetor $y = [y_1, y_2, \dots, y_{N2}]^T$ é o vetor de saída da rede;
- O símbolo $w1_{ji}$ fornece o valor do peso sináptico conectando o j -ésimo neurônio da camada (I) ao i -ésimo neurônio da camada ($I-1$);
- O símbolo $I1_j$ fornece o valor correspondente à entrada ponderada do j -ésimo neurônio da camada (I), ou seja:

$$I1_j = \sum_{i=1}^N w1_{ji} x_i; j = 1, \dots, N1 \quad (13)$$

$$I2_j = \sum_{i=1}^{N1} w2_{ji} y1_i; j = 1, \dots, N2 \quad (14)$$

- O símbolo $y1_j$ fornece o valor correspondente à saída do j -ésimo neurônio da camada (I), ou seja:

$$y1_j = g(I1_j); j = 1, \dots, N1 \quad (15)$$

$$y2_j = g(I2_j); j = 1, \dots, N2 \quad (16)$$

Os critérios de desempenho e parada do processo de treinamento são as funções erro quadrático $E(k)$ e erro quadrático médio E_M , que são definidas por:

1) Erro quadrático

Essa função fornece o valor instantâneo da soma dos erros quadráticos (em relação ao k -ésimo padrão de treinamento) de todos os neurônios da camada de saída da rede, ou seja:

$$E(k) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_2} (d_j(k) - y_{2j}(k))^2 \quad (17)$$

Onde $d_j(k)$ é o valor da saída desejada no neurônio j em relação ao k -ésimo padrão de entrada.

2) Erro quadrático médio

O erro quadrático médio ou energia média do erro quadrático médio é obtido a partir da soma dos erros quadráticos relativos a todos os padrões de entrada utilizados no conjunto de treinamento da rede, ou seja:

$$E_M = \frac{1}{p} \sum_{k=1}^p E(k) \quad (18)$$

Onde o parâmetro p especifica o número de padrões de treinamento ou a quantidade de vetores de entrada.

Para um dado conjunto de treinamento, E_M representa a função de custo como uma medida de desempenho do aprendizado. Assim, o objetivo do processo de aprendizagem, utilizando o algoritmo *backpropagation*, consiste em ajustar as matrizes de pesos $W1$ e $W2$ da rede a fim de minimizar a função de custo E_M .

O processo de ajuste dos pesos por retropropagação pode ser dividido em duas fases como descrito a seguir:

Fase 1: Ajuste dos pesos dos neurônios da camada de saída

O ajuste dos pesos dos neurônios da camada de saída é feita a partir da minimização da função erro quadrático em relação aos pesos w_{2ji} .

Utilizando a regra de diferenciação em cadeia, tem-se:

$$\nabla E_{(w_{2ji})} = \frac{\partial E}{\partial w_{2ji}} = \frac{\partial E}{\partial y_{2j}} \cdot \frac{\partial y_{2j}}{\partial I_{2j}} \cdot \frac{\partial I_{2j}}{\partial w_{2ji}} \quad (19)$$

Onde:

$$\frac{\partial I_{2j}}{\partial w_{2ji}} = y_{1i} \quad (20)$$

$$\frac{\partial y_{2j}}{\partial I_{2j}} = g'(I_{2j}) \quad (21)$$

$$\frac{\partial E}{\partial y_{2j}} = -(d_j - y_{2j}) \quad (22)$$

O símbolo d_j indica a resposta desejada para o neurônio j e $g'(\cdot)$ a derivada da função de ativação associada ao neurônio. A derivada parcial $\partial E / \partial w_{2ji}$ determina a direção de busca no espaço de pesos, para o peso sináptico w_{2ji} .

Substituindo as expressões (20), (21) e (22) na expressão (19), obtém-se:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{2ji}} = -(d_j - y_{2j}) \cdot g'(I_{2j}) \cdot y_{1i} \quad (23)$$

O ajuste deverá ser feito na direção oposta ao gradiente a fim de minimizar a função erro quadrático, ou seja:

$$\Delta w_{2ji} = -\eta \cdot \frac{\partial E}{\partial w_{2ji}} \quad (24)$$

$$\Delta w_{2ji} = -\eta \cdot \delta_{2j} \cdot y_{1i}$$

ou ainda:

$$w_{2ji}(t+1) = w_{2ji}(t) + \eta \cdot \delta_{2j} \cdot y_{1i} \quad (25)$$

Onde η é uma constante que determina a taxa de aprendizagem (tamanho do passo em direção ao ponto de mínimo da função erro quadrático) do algoritmo *backpropagation* e δ_{2j} denota o gradiente local (o qual aponta para as modificações necessárias nos pesos sinápticos) sendo definido por:

$$\delta 2_j = (d_j - y 2_j) \cdot g'(I 2_j) \quad (26)$$

Fase 2: Ajuste dos pesos dos neurônios da camada intermediária

O ajuste dos pesos dos neurônios da camada intermediária é feito normalmente a partir da função erro quadrático em relação aos pesos $w 1_{ji}$. Utilizando a regra de diferenciação em cadeia, tem-se:

$$\nabla E_{(w 1_{ji})} = \frac{\partial E}{\partial w 1_{ji}} = \frac{\partial E}{\partial y 1_j} \cdot \frac{\partial y 1_j}{\partial I 1_j} \cdot \frac{\partial I 1_j}{\partial w 1_{ji}} \quad (27)$$

Onde:

$$\frac{\partial I 1_j}{\partial w 1_{ji}} = x_i \quad (28)$$

$$\frac{\partial y 1_j}{\partial I 1_j} = g'(I 1_j) \quad (29)$$

$$\frac{\partial E}{\partial y 1_j} = \sum_{k=1}^{N2} \frac{\partial E}{\partial I 2_k} \cdot \frac{\partial I 2_k}{\partial y 1_j} = \sum_{k=1}^{N2} \frac{\partial E}{\partial I 2_k} \cdot \frac{\partial (\sum_{k=1}^{N2} w 2_{kj} \cdot y 1_j)}{\partial y 1_j} \quad (30)$$

Inserindo o resultado da multiplicação de (21) por (22) em (30), tem-se:

$$\frac{\partial E}{\partial y 1_j} = - \sum_{k=1}^{N2} \delta 2_k \cdot w 2_{kj} \quad (31)$$

Substituindo (28), (29) e (31) em (27), tem-se:

$$\frac{\partial E}{\partial w 1_j} = (- \sum_{k=1}^{N2} \delta 2_k \cdot w 2_{kj}) \cdot g'(I 1_j) \cdot x_i \quad (32)$$

Novamente, o ajuste deve ser feito na direção oposta ao gradiente. Dessa forma, a equação (32) torna-se:

$$\Delta w 1_{ji} = -\eta \cdot \frac{\partial E}{\partial w 1_{ji}} \quad (33)$$

$$\Delta w 1_{ji} = -\eta \cdot \delta 1_j \cdot x_i$$

ou ainda:

$$w 1_{ji}(t+I) = w 1_{ji}(t) + \eta \cdot \delta 1_j \cdot x_i \quad (34)$$

Onde $\delta 1_j$ denota o gradiente local e é auto-definido por:

$$\delta 1_j = g'(I1_j) \cdot \left(\sum_{k=1}^{N2} \delta 2_k \cdot w2_{kj} \right) \quad (35)$$

Portanto, aplicam-se as Fases 1 e 2 sequencialmente até que o erro quadrático médio da rede atinja um valor aceitável que é estipulado em função de cada aplicação específica.

C.4.2 Algoritmo de Levenberg-Marquardt

O algoritmo *backpropagation* ajusta os valores das matrizes de pesos em relação à direção oposta do gradiente da função erro quadrático. A utilização desse algoritmo na prática tende a convergir de forma muito lenta, exigindo assim um elevado custo computacional. Várias técnicas de otimização têm sido incorporadas ao algoritmo *backpropagation* a fim de reduzir o tempo de convergência e diminuir o esforço computacional exigido pelo mesmo. Uma das técnicas de otimização mais utilizadas para esse propósito é o algoritmo de Levenberg-Marquardt (HAGAN; MENHAJ, 1994).

O algoritmo de Levenberg-Marquardt é uma técnica baseada no método dos mínimos quadrados para modelos não-lineares que pode ser incorporada ao algoritmo *backpropagation* com o intuito de aumentar a eficiência computacional do processo de treinamento.

Nesse algoritmo, as funções erro quadrático e erro quadrático médio fornecidas respectivamente nas equações (14) e (15) podem ser expressas conjuntamente por:

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2p} \cdot \sum_{k=1}^p \sum_{j=1}^{N2} [d_j(k) - y2_j(k)]^2 \\ V &= \frac{1}{2p} \sum_{k=1}^p (d(k) - y2(k))^T \cdot (d(k) - y2(k)) \\ V &= \frac{1}{2p} \sum_{k=1}^p e^T(k) \cdot e(k) \end{aligned} \quad (36)$$

Onde o termo $e(k) = d(k) - y2(k)$ denota o vetor erro em relação ao k -ésimo padrão de treinamento. Para um padrão k específico o erro é dado por:

$$V = \frac{1}{2} e^T(k) \cdot e(k) \quad (37)$$

Dessa forma, enquanto o algoritmo *backpropagation* é um método de descida no gradiente da função erro quadrático, o algoritmo de Levenberg-Marquardt é uma aproximação do Método de Newton (BATTITI, 1992).

Nesse método a minimização de uma função $V(z)$ em relação a um vetor paramétrico z é dada por:

$$\Delta z = -[\nabla^2 V(z)]^{-1} \cdot \nabla V(z) \quad (38)$$

Onde $\nabla^2 V(z)$ denota a matriz Hessiana e $\nabla V(z)$ a matriz Jacobiana de $V(z)$. Assumindo-se que $V(z)$ é uma função que executa soma de funções quadráticas da forma:

$$V(z) = \sum_{i=1}^N e_i^2(z) \quad (39)$$

Então, a partir da equação anterior, pode ser mostrado que:

$$\nabla V(z) = J^T(z) \cdot e(z) \quad (40)$$

$$\nabla^2 V(z) = J^T(z) \cdot J(z) + S(z) \quad (41)$$

Onde $J(z)$ é a matriz Jacobiana definida por:

$$J(z) = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1(z)}{\partial z_1} & \frac{\partial e_1(z)}{\partial z_2} & \dots & \frac{\partial e_1(z)}{\partial z_N} \\ \frac{\partial e_2(z)}{\partial z_1} & \frac{\partial e_2(z)}{\partial z_2} & \dots & \frac{\partial e_2(z)}{\partial z_N} \\ \vdots & & & \\ \frac{\partial e_N(z)}{\partial z_1} & \frac{\partial e_N(z)}{\partial z_2} & \dots & \frac{\partial e_N(z)}{\partial z_N} \end{bmatrix} \quad (42)$$

e $S(z)$ é uma função dada por:

$$S(z) = \sum_{i=1}^N e_i(z) \nabla^2 e_i(z) \quad (43)$$

Inserindo-se os resultados de (40) e (41) em (38) obtém-se a equação iterativa do método de Newton, ou seja:

$$\nabla z = [J^T(z) \cdot J(z) + S(z)]^{-1} \cdot J^T(z) \cdot e(z) \quad (44)$$

No algoritmo de Levenberg-Marquardt a equação (44) é modificada da seguinte forma:

$$\nabla z = [J^T(z) \cdot J(z) + \mu I]^{-1} \cdot J^T(z) \cdot e(z) \quad (45)$$

Onde I é a matriz identidade e μ é um parâmetro que ajusta a taxa de convergência do algoritmo de Levenberg-Marquardt.

Portanto a característica principal desse algoritmo é a computação da matriz Jacobiana. Para o processo de treinamento das redes neurais do tipo *Perceptron*

multicamadas, a matriz Jacobiana (42) pode ser re-escrita em função dos pesos sinápticos da rede, ou seja:

$$J(w) = [J(w1) \mid J(w2)]_{(p) \times (N \cdot N1 + N1 \cdot N2)} \quad (46)$$

Onde:

$$w = [w1 \mid w2] = \begin{bmatrix} w1_{1,1} \dots w1_{1,N} & w1_{2,1} \dots w1_{2,N} \dots & w1_{N1,1} \dots w1_{N1,N} \perp \\ w2_{1,1} \dots w2_{1,N1} & w2_{2,1} \dots w2_{2,N1} \dots & w2_{N2,1} \dots w2_{N2,N1} \end{bmatrix}^T_{(N \cdot N1 + N1 \cdot N2) \times (1)} \quad (47)$$

$$J(w1) = \begin{bmatrix} \frac{\partial e(1)}{\partial w1_{1,1}} \dots \frac{\partial e(1)}{\partial w1_{1,N}} & \frac{\partial e(1)}{\partial w1_{2,1}} \dots \frac{\partial e(1)}{\partial w1_{2,N}} & \dots & \frac{\partial e(1)}{\partial w1_{N1,1}} \dots \frac{\partial e(1)}{\partial w1_{N1,N}} \\ \frac{\partial e(2)}{\partial w1_{1,1}} \dots \frac{\partial e(2)}{\partial w1_{1,N}} & \frac{\partial e(2)}{\partial w1_{2,1}} \dots \frac{\partial e(2)}{\partial w1_{2,N}} & \dots & \frac{\partial e(2)}{\partial w1_{N1,1}} \dots \frac{\partial e(2)}{\partial w1_{N1,N}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e(p)}{\partial w1_{1,1}} \dots \frac{\partial e(p)}{\partial w1_{1,N}} & \frac{\partial e(p)}{\partial w1_{2,1}} \dots \frac{\partial e(p)}{\partial w1_{2,N}} & \dots & \frac{\partial e(p)}{\partial w1_{N1,1}} \dots \frac{\partial e(p)}{\partial w1_{N1,N}} \end{bmatrix}_{(p) \times (N \cdot N1)} \quad (48)$$

$$J(w2) = \begin{bmatrix} \frac{\partial e(1)}{\partial w2_{1,1}} \dots \frac{\partial e(1)}{\partial w2_{1,N1}} & \frac{\partial e(1)}{\partial w2_{2,1}} \dots \frac{\partial e(1)}{\partial w2_{2,N1}} & \dots & \frac{\partial e(1)}{\partial w2_{N2,1}} \dots \frac{\partial e(1)}{\partial w2_{N2,N1}} \\ \frac{\partial e(2)}{\partial w2_{1,1}} \dots \frac{\partial e(2)}{\partial w2_{1,N1}} & \frac{\partial e(2)}{\partial w2_{2,1}} \dots \frac{\partial e(2)}{\partial w2_{2,N1}} & \dots & \frac{\partial e(2)}{\partial w2_{N2,1}} \dots \frac{\partial e(2)}{\partial w2_{N2,N1}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e(p)}{\partial w2_{1,1}} \dots \frac{\partial e(p)}{\partial w2_{1,N1}} & \frac{\partial e(p)}{\partial w2_{2,1}} \dots \frac{\partial e(p)}{\partial w2_{2,N1}} & \dots & \frac{\partial e(p)}{\partial w2_{N2,1}} \dots \frac{\partial e(p)}{\partial w2_{N2,N1}} \end{bmatrix}_{(p) \times (N1 \cdot N2)} \quad (49)$$

A partir de (47), a equação iterativa do método de Levenberg-Marquardt para o ajuste dos pesos da rede passa a ser definida por:

$$\nabla z = [J^T(W) \cdot J(W) + \mu I]^{-1} \cdot J^T(W) \cdot e(W) \quad (50)$$

Onde $e(W) = [e_1(W) \cdot e_2(W) \dots e_p(W)]^T_{(p) \times (1)}$ é o vetor erro (em relação à matriz W)

referente aos p padrões de treinamento.

Finalmente os elementos das matrizes $J(w1)$ e $J(w2)$ são obtidos sequencialmente a partir das Fases 1 e 2 do algoritmo *backpropagation* apresentado anteriormente. Com essas modificações comprova-se que o algoritmo de Levenberg-Marquardt torna-se de 10 a 100 vezes mais rápido que o algoritmo *backpropagation* convencional.

C.4.3 Algoritmo de Levenberg regularizado

Um dos problemas que ocorrem durante o treinamento de redes *Perceptron* multicamadas é o fenômeno denominado *overfitting*. Quando acontece o *overfitting*, o erro quadrático médio dos padrões de treinamento é muito pequeno, mas quando novos padrões são apresentados à rede, o erro relativo torna-se muito grande. Esse fato ocorre porque a rede memorizou apenas os padrões de treinamento, mas não conseguiu generalizar novas situações, ou seja, a rede funciona apenas como uma tabela que relaciona as entradas com as saídas.

A qualidade da generalização é influenciada pelos seguintes fatores: disponibilidade de dados para treinamento da rede, nível de representatividade do processo pelos dados de treinamento, a arquitetura escolhida para a rede neural e a própria complexidade do problema em análise. Observa-se que não se tem controle sobre o último fator. Os outros três fatores são controláveis desde que se tenha acesso aos métodos de aquisição dos dados e de concepção da rede neural.

Dessa forma, o problema do *overfitting* em geral acontece quando a base de dados utilizada no treinamento da rede é pequena. Um dos métodos para melhorar a generalização é o algoritmo de Levenberg regularizado, que consiste em modificar a função erro quadrático médio da rede. A partir da equação (37), tem-se:

$$V = \frac{1}{2p} \sum_{k=1}^p e^T(k) \cdot e(k) \quad (51)$$

A generalização é melhorada se incluir na expressão (51) o erro quadrático médio dos pesos (V_{peso}) que compõe a rede. Então a nova função erro quadrático regularizado (V_{REG}) é definida por:

$$V_{\text{REG}} = \gamma V + (1 - \gamma) V_{\text{peso}} \quad (52)$$

Onde o parâmetro γ especifica a taxa de desempenho e o termo V_{peso} é definido por:

$$V_{\text{peso}} = \frac{1}{q} \sum W_{ji} \quad (53)$$

Onde W_{ji} são os pesos da rede e q é a quantidade total de pesos que contém a rede.

Portanto, a utilização da equação (52) implica que os pesos da rede serão menores, sendo essa característica responsável por gerar uma resposta mais suave e menos suscetível à ocorrência do *overfitting*.

C.5 Rede Função de Base Radial (RBF)

Da mesma forma que a rede PMC, a rede função de base radial (RBF) também é um tipo de rede neural que pertence ao grupo das redes alimentadas adiante com múltiplas camadas. Porém, existem diferenças fundamentais entre as redes RBF e as redes PMC, as quais seguem abaixo relacionadas:

- As redes RBF possuem somente uma única camada escondida, enquanto que as redes PMC podem possuir uma ou mais camadas escondidas;
- Nas redes RBF, as funções de ativação dos neurônios da camada escondida são sempre do tipo base radial, ao invés das funções sigmoidais ou de outros tipos utilizadas pelas redes PMC;
- Nas redes RBF, as funções de ativação da camada de saída são sempre lineares saturadas (tipo rampa), enquanto que as redes PMC podem utilizar funções de ativação de diferentes tipos na camada de saída.

O diagrama esquemático de rede RBF é mostrado na Figura 39.

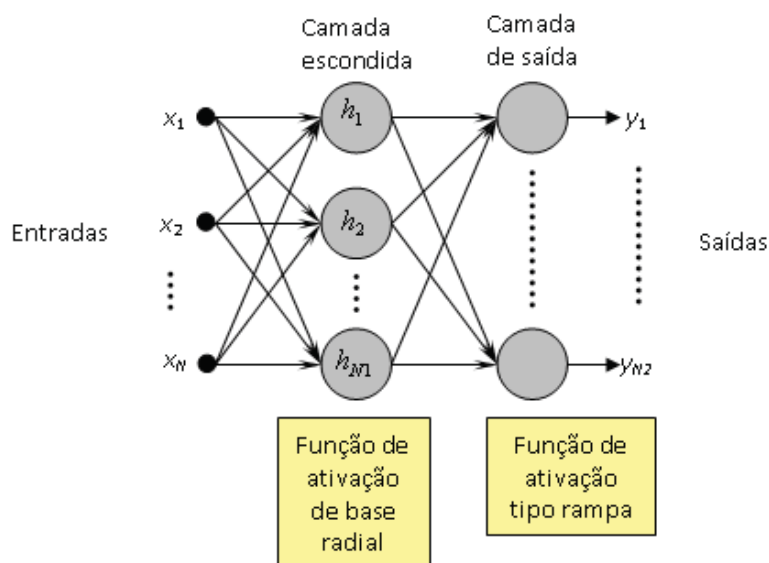


Figura 39 – Diagrama esquemático da rede função de base radial.

A convenção utilizada para a rede RBF segue abaixo:

- O parâmetro N especifica o número de variáveis em cada vetor de entrada;
- O parâmetro $N1$ especifica a quantidade de neurônios na camada escondida;
- O parâmetro $N2$ especifica o número de variáveis em cada vetor de saída, e também indica a quantidade de neurônios na camada de saída;
- O vetor $x = [x_1, x_2, \dots, x_N]^T$ é o vetor de entrada da rede;
- O vetor $y = [y_1, y_2, \dots, y_{N2}]^T$ é o vetor de saída da rede, sendo calculado da seguinte forma:

$$y_j(x) = \sum_{i=1}^{N1} w_{ij} h(\|x - c_i\|); j = 1 \dots N2 \quad (54)$$

Onde w_{ij} corresponde ao conjunto de pesos associados aos neurônios da camada de saída e c_i é o centro da função de base radial h associada ao i -ésimo neurônio da camada escondida. A função de base radial recebe como argumento a distância Euclidiana entre os elementos do vetor de entrada e os centros das funções de base radial dos neurônios da camada escondida.

A função de base radial mais comumente utilizada é a gaussiana (sino):

$$h(\|x - c_i\|) = \exp\left(-\frac{\|x - c_i\|^2}{\delta^2}\right) \quad (55)$$

Onde o parâmetro δ é a variância (*spread*) da curva gaussiana.

C.5.1 Algoritmo de treinamento para a rede RBF

Segundo Wang (2009), o treinamento da rede neural RBF envolve a determinação dos seguintes parâmetros:

1) Centros das funções de base radial

Os centros das funções de base radial associadas com os neurônios da camada escondida são escolhidos a partir dos dados de entrada utilizados no conjunto de treinamento. Considerando que o conjunto de treinamento é formado por M amostras, o centro da função de base radial associada ao i -ésimo neurônio da camada escondida é dado por:

$$c_i = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M x_k \quad (56)$$

2) Variância das funções de base radial

A variância (*spread*) das funções de base radial é determinada por normalização através da seguinte expressão:

$$\delta = \frac{d}{\sqrt{n}} \quad (57)$$

Onde d é a distância máxima entre dois centros quaisquer e n é o número de centros.

3) Pesos associados aos vetores da camada de saída

Os pesos dos vetores da camada de saída da rede RBF são determinados conforme as equações abaixo:

$$\Delta w_{ij} = -\frac{\eta}{m} \sum_{p=1}^m [o'_j(x_p) - o_j(x_p)] y_i(x_p) \quad (58)$$

$$w_{ij} = w_{ij} + \Delta w_{ij} \quad (59)$$

Onde $o'_j(x_p)$ é a saída real observada, $o_j(x_p)$ é a saída desejada, $y_i(x_p)$ corresponde à saída das funções de base radial (camada escondida), m corresponde ao número de saídas da rede e η é a taxa de aprendizado.