

**UNIVERSIDADE DO VALE DO RIO DOS SINOS – UNISINOS
UNIDADE ACADÊMICA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM GEOLOGIA
NÍVEL MESTRADO**

Joice Cagliari

**FUNÇÃO DE PEDOTRANSFERÊNCIA PARA ESTIMAR O FÓSFORO
REMANESCENTE EM SOLOS, UTILIZANDO REDE NEURAL ARTIFICIAL**

São Leopoldo

2010

Joice Cagliari

**FUNÇÃO DE PEDOTRANSFERÊNCIA PARA ESTIMAR O FÓSFORO
REMANESCENTE EM SOLOS, UTILIZANDO REDE NEURAL ARTIFICIAL**

Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do título de Mestre, pelo Programa de Pós-
Graduação em Geologia da Universidade do Vale do
Rio dos Sinos.

Orientador: Prof^o. Dr. Maurício Roberto Veronez
Co-orientador: Prof^o. Dr. Marcelo Eduardo Alves

São Leopoldo

2010

C131f Cagliari, Joice

Função de pedotransferência para estimar o fósforo remanescente em solos, utilizando rede neural artificial / por Joice Cagliari. -- São Leopoldo, 2010.

103 f. : il. ; 30 cm.

Dissertação (mestrado) – Universidade do Vale do Rio dos Sinos, Programa de Pós-Graduação em Geologia, São Leopoldo, RS, 2010.

“Orientação: Prof. Dr. Maurício Roberto Veronez (Universidade do Vale do Rio dos Sinos, Ciências Exatas e Tecnológicas); Co-orientador: Prof. Dr. Marcelo Eduardo Alves, Universidade de São Paulo, Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, Ciências Exatas”.

1.Redes Neurais Artificiais – Geologia. 2.Solos – Teor de fósforo. 3.Fósforo remanescente. 4.Função de pedotransferência. I.Título.

CDU 004.855.5:55
553.64

Catálogo na publicação:
Bibliotecária Carla Maria Goulart de Moraes – CRB 10/1252

Joice Cagliari

**FUNÇÃO DE PEDOTRANSFERÊNCIA PARA ESTIMAR O FÓSFORO
REMANESCENTE EM SOLOS, UTILIZANDO REDE NEURAL ARTIFICIAL**

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre, pelo Programa de Pós-Graduação em Geologia da Universidade do Vale do Rio dos Sinos (Área de Concentração: Meio Ambiente e Recursos Minerais).

Aprovado em ____/____/____

BANCA EXAMINADORA

Dr. Marihus Altoé Baldotto – Universidade Estadual do Norte Fluminense - UENF

Dr. Francisco Manoel Wohnrath Tognoli – Universidade do Vale do Rio dos Sinos - UNISINOS

Dr. Maurício Roberto Veronez – Universidade do Vale do Rio dos Sinos - UNISINOS

*Dedico este trabalho à minha família e
a todos que acreditaram em mim.*

AGRADECIMENTOS

Ao Programa de Suporte à Pós-Graduação de Instituições de Ensino Particulares (PROSUP) da CAPES, que custeou as despesas do curso.

Ao Prof. Dr. Maurício Roberto Veronez, orientador deste trabalho, pelo acompanhamento, apoio e amizade.

Ao Prof. Dr. Marcelo Eduardo Alves, co-orientador deste trabalho, pelo apoio e colaboração.

Aos pesquisadores do Centro de Solos e Recursos Ambientais do Instituto Agronômico de Campinas, pela cessão das amostras de solo e de seus respectivos dados analíticos.

Ao Prof. Dr. Marihus Altoé Baldotto e ao Prof. Dr. Francisco Manoel Wohnrath Tognoli, que participaram da banca examinadora, pelas valiosas contribuições.

Aos professores que participaram da avaliação do Projeto de Mestrado, Seminário Inicial e Seminário Final, pelas críticas e sugestões que contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho.

À minha família, pelo apoio incondicional e por estar ao meu lado em todos os momentos.

Ao meu noivo pelo apoio e compreensão.

Aos meus colegas de mestrado, pelos momentos de descontração e também de discussões, em especial a Paula Schmitt.

RESUMO

O fósforo remanescente consiste na concentração de fósforo que permanece em solução após a agitação por 1 hora de uma amostra de solo com solução de CaCl_2 $0,01 \text{ mol L}^{-1}$ contendo 60 mg L^{-1} P. O valor de fósforo remanescente pode ser utilizado como um bom indicador da capacidade de sorção aniônica de um solo haja vista ser mais sensível a sua composição mineralógica do que ao teor de sua fração argila. No Brasil, a utilização agrônômica do fósforo remanescente é contemplada no sistema oficial de recomendação de fertilizantes e corretivos do Estado de Minas Gerais. O objetivo principal deste estudo foi o de desenvolver uma função de pedotransferência que permitisse estimar com razoável exatidão o valor de fósforo remanescente de solos representativos do Estado de São Paulo, a partir de outros atributos químicos de mais simples e/ou rotineira determinação laboratorial. Nesse contexto, duas funções de pedotransferência foram desenvolvidas com base em redes neurais artificiais (RNA) e análises de regressão linear múltipla (RLM), utilizando um banco de dados constituído por propriedades físicas e químicas de solos amostrados em diferentes localidades do Estado de São Paulo. As redes alimentadas adiante com múltiplas camadas foram utilizadas para desenvolver a função de pedotransferência baseada em RNA e a topologia foi determinada a partir de experimentos sucessivos. Os critérios de escolha da melhor rede neural foram, simultaneamente, o desempenho na etapa de treinamento, medido por meio do erro quadrático médio, e a capacidade de generalização, avaliada por meio de análises estatísticas entre os valores de P_{rem} estimados e determinados analiticamente. A topologia da rede que melhor estimou o fósforo remanescente foi [3 14 1], ou seja, três neurônios na camada de entrada, quatorze em uma única camada intermediária e um na camada de saída; a função de ativação utilizada foi a sigmoideal logística, os valores de entrada foram normalizados entre [0;1] e o algoritmo de aprendizagem utilizado foi o *resilient backpropagation*. As três variáveis da camada de entrada foram o valor de pH medido em solução de NaF 1 mol L^{-1} (pH NaF), a soma de bases trocáveis (SB) e o teor de alumínio trocável (Al^{3+}), sendo as duas últimas determinadas rotineiramente em análises de solo e a primeira de mais fácil e rápida obtenção que o fósforo remanescente. A função de pedotransferência baseada em RLM foi desenvolvida considerando as mesmas variáveis de entrada utilizadas na função de pedotransferência baseada em RNA. A comparação entre os desempenhos obtidos, para um mesmo conjunto de validação, mostrou que as funções de pedotransferência baseadas em redes neurais apresentam estimativas mais exatas do fósforo remanescente. Apesar do conjunto de dados utilizado não ser suficientemente abrangente para o estabelecimento de uma função de pedotransferência definitiva para a estimativa do fósforo remanescente, os resultados do presente trabalho indicam como promissor o desenvolvimento de um massivo banco de dados por meio do aproveitamento dos resultados analíticos continuamente gerados pelos vários laboratórios brasileiros dedicados à avaliação da fertilidade do solo e que contemple os valores de fósforo remanescente e pH NaF. Tal banco de dados permitirá o desenvolvimento de uma função de pedotransferência baseada em redes neurais artificiais cuja utilização possibilitará o cálculo imediato de valores suficientemente exatos de fósforo remanescente com razoável economia de recursos financeiros que seriam empregados na análise de um grande número de amostras.

Palavras-chave: Fósforo remanescente. Função de pedotransferência. Redes neurais artificiais. Regressão linear múltipla.

ABSTRACT

The remaining phosphorus consists of the P concentration that remains in solution after shaking for 1 hour a soil sample with $0.01 \text{ mol L}^{-1} \text{ CaCl}_2$ containing $60 \text{ mg L}^{-1} \text{ P}$. The remaining phosphorus values can be used as suitable indicators of the soil capacity of anion sorption due to be more dependable on the soil mineralogy than on the soil clay content. In Brazil, the remaining phosphorus is used as an ancillary variable in the official guidelines for determining fertilizer and amender requirements of agricultural soils of the Minas Gerais state. The main goal of this research was to develop a pedotransfer function (PTF) capable of providing fairly accurate estimates of remaining phosphorus values of representative soils of the São Paulo state from often-determined soil chemical properties and/or from other ones of easier determination. In this context, two pedotransfer functions were developed by using artificial neural networks (ANN) and multiple regression analysis (MRA) applied to a database formed by values of soil chemical and physical properties derived from soil surveys previously carried out in different locations of the São Paulo state. The multi-layer feedforward neural networks approach was used for the development of the ANN-based PTF being its topology determined from successive experiments. The simultaneous criteria adopted for choosing the best neural network were the performance during the training stage, measured by the mean squared error, and its capacity of providing accurate Prem values, which was evaluated by using a validation database in which statistical comparisons were done between the measured and estimated Prem values. The topology of the network that provided the most accurate estimates of the remaining phosphorus was [3 14 1], i.e., three neurons at the input layer, fourteen at a unique hidden layer and one neuron at the output layer; further development features included the use of the sigmoid logistic model as activation function, the input of data normalized in the [0;1] interval and the use of the *resilient backpropagation* learning algorithm. The three variables at the input layer were the soil pH value measured in $1 \text{ mol L}^{-1} \text{ NaF}$ (pH NaF), the sum of exchangeable bases (SB) and the soil content of exchangeable aluminum (Al^{3+}), being the two last ones usually determined in soil test laboratories whereas the pH NaF determination is easier than the remaining phosphorus one. The MRA-based PTF was developed considering the same input variables of the ANN-based one, i.e., pH NaF, SB and Al^{3+} . The comparisons performed with a same validation database showed that the pedotransfer function developed from artificial neural networks provided more accurate estimates of remaining phosphorus values. Despite the database used for the PTF development not be so comprehensive for the establishment of a definitive pedotransfer function for estimating remaining phosphorus values, the results of the present research indicate as promising the development of a massive database from chemical results often obtained by the Brazilian laboratories dedicated to soil fertility evaluation and that includes Prem and pH NaF values. This database will allow the development of a comprehensive ANN-based pedotransfer function capable of not only calculating suitable Prem values for practical applications but also reducing the expenses related to the analyses of a great number of soil samples.

Keywords: Remaining phosphorus. Pedotransfer functions. Artificial neural networks. Multiple regression analysis.

LISTA DE FIGURAS

Figura 01 – Neurônio biológico.....	27
Figura 02 – Modelo não-linear de um neurônio artificial.	28
Figura 03 – Funções de ativação mais utilizadas.	30
Figura 04 – Arquitetura das RNA: (a) rede alimentada adiante com camada única, (b) rede alimentada adiante com múltiplas camadas, (c) rede recorrente. Fonte: Adaptado de Haykin (2001).....	32
Figura 05 – Rede MLP com topologia [2 4 4 2]. Fonte: Haykin (2001).	34
Figura 06 – Localização da área de estudo.....	43
Figura 07 – Etapas da implementação de uma função de pedotransferência para estimar o fósforo remanescente por meio de redes neurais artificiais.....	47
Figura 08 – Localização de alguns pontos de amostragem de solo no Estado de São Paulo...55	
Figura 09 – Topologia da rede neural artificial 1063 [3 14 1]: 3 neurônios na camada de entrada, 14 na camada intermediária e 1 na camada de saída.	64
Figura 10 – Curva de desempenho das etapas de treinamento e validação da rede neural artificial 1063, medido por meio do erro quadrado médio (EQM).	65
Figura 11 – Comparação entre os valores de fósforo remanescente (Prem) determinados e estimados pela rede neural artificial 1063 (RNA1063), para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.	67
Figura 12 – Diagrama de dispersão dos valores de fósforo remanescente (Prem) determinados e estimados, por meio da rede neural artificial (RNA) 1063, para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.	68
Figura 13 – Diagrama de dispersão dos resíduos gerados por meio das diferenças entre os valores de fósforo remanescente (Prem) determinado e os valores estimados pela rede neural artificial (RNA) 1063, para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.....	69
Figura 14 – Comparação entre os valores de fósforo remanescente (Prem) determinados e estimados pela análise de regressão linear múltipla (RLM), para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.	70
Figura 15 – Diagrama de dispersão dos valores de fósforo remanescente (Prem) determinados e estimados, por meio de análise de regressão linear múltipla (RLM), para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.	71

Figura 16 – Diagrama de dispersão dos resíduos gerados por meio das diferenças entre os valores de fósforo remanescente (Prem) determinado e os valores estimados pela análise de regressão linear múltipla (RLM), para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.72

LISTA DE TABELAS

Tabela 01 – Características dos solos e classes de ocorrência no Estado de São Paulo.....	43
Tabela 02 – Estatística descritiva do conjunto total de dados.	56
Tabela 03 – Estatística descritiva do conjunto de dados após análise de dados perdidos.....	58
Tabela 04 – Coeficientes de correlação linear (r) entre o Prem e os demais atributos do solos.	59
Tabela 05 – Experimentos realizados por meio de redes neurais artificiais, para estimar o fósforo remanescente (Prem), que obtiveram desempenho na etapa de validação superior a 0,9, medido pelo coeficiente de determinação (R^2).	62
Tabela 06 – Topologia e características das redes neurais artificiais que apresentaram desempenho superior a 0,9, medido por meio do coeficiente de determinação (R^2).	63
Tabela 07 – Pesos sinápticos dos neurônios da camada intermediária e de saída da rede neural artificial 1063.....	66
Tabela 08 – Bias dos neurônios da camada intermediária e de saída, da rede neural artificial 1063.	66
Tabela 09 – Resultados da regressão linear simples entre os valores de fósforo remanescente determinados ($Prem_d$) e os estimados ($Prem_e$) pela rede neural artificial 1063(RNA1063).	67
Tabela 10 – Resultados da análise de regressão linear múltipla para estimar o fósforo remanescente (Prem) a partir dos atributos do solo pH medido em fluoreto de sódio (pH NaF) e soma de bases (SB), para o conjunto de ajuste formado por 70% dos dados.	69
Tabela 11 – Resultados da regressão linear simples entre os valores de fósforo remanescente determinados ($Prem_d$) e os estimados ($Prem_e$) pela análise de regressão linear múltipla.....	71
Tabela 12 – Estimativa da necessidade de cálcio no solo, para as amostras do conjunto de validação, a partir de valores de fósforo remanescente (Prem) determinados e estimados por meio de rede neural artificial (RNA) e regressão linear múltipla (RLM).	73

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ANN	<i>Artificial neural networks</i>
CMSP	Capacidade máxima de sorção de P
<i>EQM</i>	Erro quadrático médio
ERMA	Erro relativo médio absoluto
ESALQ/USP	Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” da Universidade de São Paulo
FPT	Função de pedotransferência
IAC	Instituto Agrônomo de Campinas
LOGSIG	Função de ativação sigmoidal logística
max	Maior valor observado da variável a normalizar
min	Menor valor observado da variável a normalizar
MLP	<i>Multilayer perceptron</i>
MRA	<i>Multiple regression analysis</i>
<i>norm</i>	Valor normalizado no intervalo entre [0;1] ou [-1;1]
PDP	<i>Parallel Distributed Processing</i>
PPGeo/Unisinos	Programa de Pós-Graduação em Geologia da Universidade do Vale do Rio dos Sinos
PTF	<i>Pedotransfer function</i>
Prem	Fósforo remanescente
Prem _e	Fósforo remanescente estimado
Prem _d	Fósforo remanescente determinado
PURELIN	Função de ativação linear
RM	Residual médio
RNA	Rede Neural Artificial
RQEM	Raiz quadrada do erro médio
SB	Soma de Bases
SPSS	<i>Statistical Package for the Social Sciences</i>
<i>SQR</i>	Soma do quadrado dos resíduos
TANSIG	Função de ativação sigmoidal tangente hiperbólica
TFSA	Terra fina seca ao ar
TRAINLM	Algoritmo de aprendizagem Levenberg-Marquart

TRAINRP Algoritmo de aprendizagem *resilient backpropagation*
TRAINSCG Algoritmo de aprendizagem gradiente conjugado escalonado

LISTA DE SÍMBOLOS

Al	Alumínio
Al(OH) ₃	Gibbsita
Al ₂ O ₃	Óxido de alumínio
Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	Caulinita
Al ³⁺	Alumínio trocável
b _k	<i>Bias</i>
C	Carbono oxidável
Ca ²⁺	Cálcio
CaCl ₂	Cloreto de cálcio
e	Erro
e _i	Erro ou desvio padrão associado à equação de regressão
Fe	Ferro
Fe ₂ O ₃	Hematita
FeOOH	Goethita
H ⁺	Hidrogênio extraível
H+Al	Acidez total
i	Amostra
k	Constante da função de ativação linear
K ⁺	Potássio
KCl	Cloreto de Potássio
Ki	Índice de intemperismo
Kr	Índice de intemperismo
m	Saturação por alumínio
n	Número de amostras
Na ⁺	Sódio
NaF	Fluoreto de Sódio
NO ₃ ⁻	Nitrato
O	Oxigênio
OH	Hidroxilas
P	Fósforo
pH H ₂ O	pH medido em água
pH KCl	pH medido em solução de cloreto de potássio

pH NaF	pH medido em solução de fluoreto de sódio
r	Coefficiente de Pearson
R^2	Coefficiente de determinação
$real$	Valor de entrada
SiO_2	Sílica
T	Capacidade de troca de cátions potencial
u_k	Saída do combinador linear do modelo
V	Saturação por bases
w	Peso sináptico
w_{k1}, w_{k2} e w_{km}	Pesos
w_{kj}	Peso sináptico no neurônio k
X	Variável independente
x_1, x_2 e x_m	Sinais de entrada
X_{1i}	Valor do nível i ($i = 1, 2, \dots, n$) da variável X_1
X_{2i}	Valor do nível i da variável X_2
x^i	Informação de entrada
x_j	Sinais de entrada
X_{pi}	Valor do nível i da variável X_p
Y	Variável dependente
Y_i	Valor observado da variável Y no nível i das variáveis independentes
y_k	Sinal de saída
y_{max}	Maior valor real observado da variável de saída
y_{min}	Menor valor observado da variável de saída
y_{norm}	Valor de saída normalizado no intervalo de [0;1] ou [-1;+1]
y_{real}	Valor de saída observado
B_0	Constante de regressão
B_1	Coefficiente de regressão para a variável X_1
B_2	Coefficiente de regressão para a variável X_2
β_p	Coefficiente de regressão para a variável X_p
$\varphi(\cdot)$	Função de ativação
y_d^i	Informação de saída
Σ	Função soma

α	Significância estatística
ϕ_m	Porosidade média
ΔpH	Varição do pH
a	Parâmetro de inclinação da função logística

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	18
1.1 Objetivos.....	19
1.2 Justificativa.....	19
2 REVISÃO DA LITERATURA.....	21
2.1 Fósforo remanescente.....	21
2.2 Funções de pedotransferência.....	24
2.2.1 REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS.....	24
2.2.1.1 <i>Histórico das redes neurais artificiais</i>	25
2.2.1.2 <i>Inspirações biológicas</i>	26
2.2.1.3 <i>Neurônio artificial</i>	28
2.2.1.4 <i>Arquitetura das redes</i>	31
2.2.1.5 <i>Perceptron multicamadas</i>	33
2.2.1.6 <i>Processo de aprendizagem</i>	34
2.2.1.7 <i>Algoritmo de aprendizagem backpropagation</i>	36
2.2.1.8 <i>Etapa de treinamento</i>	39
2.2.1.9 <i>Etapa de validação</i>	40
2.2.1.10 <i>Aplicações de redes neurais</i>	40
3 CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO.....	43
4 MATERIAL E MÉTODOS.....	45
4.1 Amostragem e análise dos solos.....	45
4.1.1 CARACTERIZAÇÃO FÍSICA.....	45
4.1.2 CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA E MINERALÓGICA.....	45
4.1.3 CARACTERIZAÇÃO ELETROQUÍMICA.....	46
4.2 Desenvolvimento da função de pedotransferência.....	46
4.2.1 PRÉ-PROCESSAMENTO DOS DADOS.....	47
4.2.1.1 <i>Avaliação dos dados perdidos</i>	48
4.2.1.2 <i>Normalização</i>	48
4.2.1.3 <i>Correlação linear</i>	49
4.2.1.4 <i>Divisão do conjunto de dados</i>	49
4.2.2 FUNÇÃO DE PEDOTRANSFERÊNCIA BASEADA EM REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS.....	49
4.2.2.1 <i>Topologia</i>	50

4.2.2.2	<i>Processo de aprendizagem</i>	50
4.2.2.3	<i>Etapa de treinamento</i>	50
4.2.2.4	<i>Etapa de validação</i>	51
4.2.2.4	<i>Árvore de testes</i>	51
4.2.2.5	<i>Desnormalização dos resultados</i>	52
4.2.2.6	<i>Desempenho da rede</i>	52
4.2.3	FUNÇÃO DE PEDOTRANSFERÊNCIA BASEADA EM ANÁLISE DE REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA	53
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	55
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	55
5.1	Caracterização dos solos.....	55
5.2	Desenvolvimento da função de pedotransferência	57
5.2.1	PRÉ-PROCESSAMENTO DOS DADOS	58
5.2.2	ÁRVORE DE TESTES	60
5.2.3	ANÁLISE DE REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA.....	69
7	REFERÊNCIAS	77
	ANEXO A – CLASSIFICAÇÃO, LOCALIZAÇÃO, PROFUNDIDADE E MATERIAL DE ORIGEM DAS AMOSTRAS DE SOLO	82
	ANEXO B – ATRIBUTOS FÍSICOS, QUÍMICOS, MINERALÓGICOS E ELETROQUÍMICOS DAS AMOSTRAS DE SOLOS	84
	ANEXO C – ÁRVORE DE TESTES.....	87

1 INTRODUÇÃO

O fósforo remanescente (Prem) consiste em um atributo pedológico que apresenta elevado potencial de utilização como orientador das práticas de correção e fertilização dos solos agrícolas bem como indicador da vulnerabilidade dos mesmos à lixiviação de ânions como o nitrato. Atualmente, o fósforo remanescente tem sido utilizado no sistema oficial de recomendação de fertilizantes e corretivos do estado de Minas Gerais (Alvarez *et al.* 1999ab, Alvarez & Ribeiro 1999); contudo, acredita-se que sua utilização possa ser futuramente estendida para outros estados brasileiros.

O Prem mostra-se mais adequado que o teor de argila para a interpretação de resultados de análises químicas do solo quanto à disponibilidade de fósforo e enxofre e para o cálculo das quantidades de calcário e/ou de gesso a serem aplicadas nos solos agrícolas pelo fato de seu valor ser mais dependente da composição mineralógica da fração argila do que do teor dessa fração no solo (Alves & Lavorenti 2004a). Deste modo, dois solos igualmente argilosos podem apresentar valores distintos de Prem e conseqüentemente vão requerer, por exemplo, diferentes quantidades de calcário para a correção de um mesmo nível de acidez e diferentes doses de fertilizante para atender a uma mesma demanda de fósforo apresentada por uma mesma espécie vegetal.

Embora a determinação laboratorial do Prem seja relativamente simples, a possibilidade de obtenção de estimativas exatas desse atributo, para fins práticos, a partir de outras rotineiramente determinados e/ou de determinação ainda mais simples pode proporcionar maior rapidez e redução de custos analíticos, sobretudo em casos nos quais um grande número de amostras necessita ser analisado. Uma opção nesse sentido consiste no desenvolvimento de uma função de pedotransferência (FPT), a qual consiste em uma equação e/ou em um conjunto de equações que possibilitam estimar valores razoavelmente exatos de Prem, a partir dos valores de outros atributos de mais fácil ou rápida determinação (Budiman *et al.* 2003). Dentre esses atributos destaca-se o valor de pH medido em suspensão de solo e solução de NaF 1 mol L⁻¹ (pH NaF), que mede a quantidade de íons OH disponíveis para troca com o íon flúor (F) (Gilkes & Hughes 1994) e que apresenta dependência da composição mineralógica do solo muito similar à apresentada pelo Prem (Alves & Lavorenti 2004a).

Normalmente, as FPT são obtidas por meio do ajuste de modelos de regressão linear múltipla; todavia, mais recentemente, essas funções têm sido desenvolvidas utilizando-se as

chamadas redes neurais artificiais (RNA), dispositivos computacionais que simulam a capacidade humana de resolver problemas. As RNA têm a capacidade de aprender por meio de exemplos e de apresentar respostas satisfatórias para dados não compreendidos no treinamento. Além disso, possuem um poder de predição superior aos dos outros modelos usualmente utilizados para o desenvolvimento de funções de pedotransferência (Budiman *et al.* 2003), devido principalmente à capacidade desses modelos em mapear funções com múltiplas variáveis, de extrair informações não explícitas no conjunto de dados e de atuar como modelos lineares ou não-lineares (Haykin, 2001; Braga et al., 2007).

1.1 Objetivos

O objetivo geral deste estudo foi o de desenvolver uma função de pedotransferência para estimar o valor do fósforo remanescente de amostras de solo, utilizando redes neurais artificiais.

Os objetivos específicos foram:

- testar diferentes configurações de rede no sentido de definir a rede neural artificial mais adequada para estimar o valor do fósforo remanescente. Dentre os diferentes testes têm-se: (i) variáveis de entrada; (ii) função de ativação; (iii) número de camadas intermediárias e de neurônio em cada camada; (iv) algoritmos *backpropagation* e (v) ciclos de treinamento.
- avaliar as vantagens do uso da rede neural comparativamente à análise de regressão linear múltipla no desenvolvimento de uma função de pedotransferência para a estimativa do valor do fósforo remanescente de amostras de solo.

1.2 Justificativa

O desenvolvimento de funções de pedotransferência pode trazer vantagens para áreas da ciência do solo, como, por exemplo, a facilidade de quantificação de determinados atributos pedológicas com a redução do tempo despendido para os procedimentos laboratoriais e dos custos associados. Embora a análise de regressão linear múltipla, na qual a variável de interesse é considerada como dependente de outras mais facilmente determináveis, constitua uma forma de desenvolvimento de função de pedotransferência, as redes neurais artificiais apresentam potencial vantagem em relação ao uso da regressão. A principal delas é que, ao contrário da regressão linear, as redes neurais artificiais podem realizar um

mapeamento não-linear de entrada-saída e, conseqüentemente, possuem um maior poder de predição.

A estimativa do fósforo remanescente a partir de outras variáveis determinadas rotineiramente e/ou de determinação ainda mais simples, pode constituir uma função de pedotransferência. Embora o Prem seja uma variável potencialmente útil para o manejo químico dos solos intemperizados da região tropical e apresente simples determinação laboratorial, acredita-se que o desenvolvimento de um sistema que permita a obtenção de valores exatos do mesmo a partir de variáveis cujas determinações são indispensáveis para a avaliação da fertilidade do solo e de variáveis de determinação ainda mais simples possa resultar em economia significativa de tempo e de recursos financeiros que seriam despendidos na análise de um grande número de amostras, como o normalmente observado em laboratórios de análises químicas de rotina destinadas à avaliação da fertilidade do solo.

2 REVISÃO DA LITERATURA

A revisão da literatura aqui apresentada aborda os principais temas envolvidos no desenvolvimento deste estudo: o fósforo remanescente e sua relação com outros atributos do solo, as características das funções de pedotransferência e das redes neurais artificiais.

2.1 Fósforo remanescente

Fósforo remanescente (Prem) é a denominação dada a um índice determinado em laboratório que consiste na concentração de fósforo (P) que permanece em solução após a agitação de uma solução contendo concentração conhecida de P com uma amostra de solo. Como o solo adsorve parte ou a totalidade do P contido na solução adicionada, os valores de Prem são normalmente menores que o da concentração inicial de P. Tal índice foi proposto por Bache & Williams (1971) para caracterizar, por meio de única medida e de forma equivalente ao do método das curvas de sorção, a capacidade de retenção de P apresentada por um solo. Para fins de rotina laboratorial, a determinação do fósforo remanescente consiste na agitação, durante 1 hora, de terra fina seca ao ar (TFSA) com uma solução CaCl_2 0,01 mol L^{-1} contendo 60 mg L^{-1} de P, na relação 1:10, separação do solo e da solução por meio de filtragem ou centrifugação e na quantificação do P na solução obtida (Alvarez V. *et al.* 2000).

A fração argila ($\phi < 2 \mu\text{m}$) dos solos das regiões tropical e subtropical apresenta-se constituída por proporções variáveis de minerais silicatados, como caulinita, vermiculita e ilita, e de óxidos tais como gibbsita, hematita, goethita, maghemite, anatásio e rutilo (Schwertmann & Herbillon 1992). Na maioria dos casos, observa-se na fração argila dos solos brasileiros a predominância quantitativa de caulinita [$\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$], gibbsita [$\text{Al}(\text{OH})_3$], hematita (Fe_2O_3) e goethita (FeOOH) (Resende *et al.* 2005), com incremento na proporção dos óxidos em relação à de caulinita na medida em que esses solos se tornam mais intemperizados. Como os óxidos de ferro e de alumínio são os principais adsorventes de P presentes nos solos tropicais (Novais & Smith 1999), solos altamente intemperizados apresentam baixos valores de Prem.

Apesar da sorção do ânion fosfato não se dar somente por atração eletrostática com cargas positivas e ocorrer por meio de troca com grupos hidroxilas ($-\text{OH}$) das superfícies de minerais como a caulinita, gibbsita e goethita (Mott 1981), pode-se afirmar que quanto menor for o valor de Prem de um solo maior será a densidade superficial de cargas líquida positiva

por ele apresentado. Tal associação se deve ao fato de que os grupos -OH passíveis de troca pelo ânion fosfato são mais abundantes nos óxidos como gibbsita e goethita que, por sua vez, apresentam elevados valores de ponto isoelétrico. Desse modo, solos altamente intemperizados apresentam elevada capacidade de sorção de fósforo e elevada densidade de carga elétrica superficial positiva. Por essa razão, o fósforo remanescente pode ser utilizado como um índice indireto tanto da abundância de grupos OH quanto de cargas positivas existentes em um solo e assim pode-se concluir que solos com baixo valor de Prem apresentam maior capacidade de sorção de ânions sejam eles adsorvidos por meio de troca de ligantes ou por atração eletrostática.

A vantagem de utilização do Prem como indicador da capacidade de sorção aniônica de um solo se deve a sua facilidade de determinação associada ao fato do mesmo se constituir em uma medida cujo valor é mais dependente da composição mineralógica do solo do que do teor de sua fração argila (Alves & Lavorenti 2004a). Tal fato faz com que, a depender de suas composições mineralógicas, dois solos com o mesmo teor de argila possam apresentar valores significativamente distintos de Prem e também diferentes capacidades de sorção de ânions.

Embora alguns trabalhos indiquem que a matéria orgânica possa diminuir a velocidade de sorção de P pelo solo (Afif *et al.* 1995), via de regra, a maioria dos solos tropicais apresenta baixos teores de carbono orgânico e, desse modo, pode-se considerar que a maior parte da expressão do Prem seja devida à influência da composição inorgânica do solo, em especial, de suas frações silte e argila.

A sorção de fósforo diminui a eficiência agrônômica dos fertilizantes fosfatados (Novais & Smith 1999); por essa razão, considerando-se um exemplo hipotético de mesma cultura agrícola e dois solos com o mesmo teor deficiente de P, uma maior quantidade de fertilizante fosfatado deverá ser aplicada no solo mais intemperizado para suprir a demanda nutricional da cultura pelo elemento. De forma similar, dada a maior riqueza dos solos altamente intemperizados em grupos -OH de superfície passíveis de desprotonação ($-OH \rightarrow -O^- + H^+$), quanto mais argiloso e/ou intemperizado é um solo, maior é o seu pK_a e assim uma maior quantidade de calcário torna-se necessária para promover a mesma variação de pH que seria observada em solo menos argiloso e/ou intemperizado. Por essa razão, o Prem mostra-se mais adequado que o teor de argila como atributo auxiliar para a interpretação de resultados de análises químicas do solo quanto à disponibilidade de fósforo e enxofre e para o cálculo das quantidades de calcário e/ou de gesso a serem aplicados nos solos agrícolas. No Brasil, tais utilizações do Prem são contempladas no sistema oficial de recomendação de fertilizantes e corretivos do estado de Minas Gerais (Alvarez *et al.* 1999ab,

Alvarez & Ribeiro 1999). Outra utilização potencial do Prem consiste na indicação da capacidade de sorção eletrostática de nitrato (NO_3^-) do solo haja vista solos de maior sorção aniônica apresentarem menores valores de Prem. Desse modo, solos com baixos valores de Prem são, ao menos potencialmente, mais resistentes à lixiviação de NO_3^- , processo que pode contribuir para a contaminação de aquíferos subterrâneos pelo referido ânion.

Normalmente, a capacidade de retenção de fósforo de um solo é avaliada por meio do método das isotermas de sorção. Nesse método, certa quantidade de solo é colocada em contato com soluções contendo concentrações crescentes de P; em seguida o conjunto de frascos contendo solo e solução é agitado, geralmente, por 24 horas período após o qual se efetua a quantificação do P que resta em cada solução. Com base nesse valor e no valor da concentração inicial de P calcula-se a quantidade de P retida pelo solo e, em seguida, elabora-se uma curva que relaciona cada concentração final de P na solução com a respectiva quantidade sorvida. Esse conjunto de pontos experimentais permite o ajuste de equações de sorção não lineares como o modelo de Langmuir, o qual apresenta um parâmetro cuja estimativa representa a capacidade máxima de sorção de P (CMSP) do solo (Novais & Smith 1999).

Embora a determinação da CMSP do solo seja útil na orientação da prática da adubação fosfatada, tal avaliação se mostra inviável em laboratórios de análises químicas de rotina para avaliação da fertilidade do solo. Esse fato levou alguns pesquisadores a buscarem medidas de mais fácil execução que apresentassem correlação significativa com a CMSP e que assim pudessem ser utilizadas como variável auxiliar para a recomendação da fertilização fosfatada. Dentre as variáveis testadas, o valor de pH do solo determinado em solução de fluoreto de sódio 1 mol L^{-1} (pH NaF) após tempos de contato de 1 hora (Bolland *et al.* 1996) ou de 20 minutos (Gilkes & Hughes 1994) de 1 g de solo com 40 mL de solução se mostrou muito promissor como indicador indireto da capacidade de sorção de fósforo de solos australianos (Singh & Gilkes 1991, Gilkes & Hughes 1994, Bolland *et al.* 1996).

Posteriormente, Alves & Lavorenti (2004b) verificaram que quanto mais intemperizado e oxidado é um solo, maior é seu valor de pH NaF, fato que explica a elevada correlação inversa existente entre o Prem e o pH NaF (Alves & Lavorenti 2004a). Tal observação poderia sugerir a utilização do pH NaF em substituição do Prem como variável auxiliar na recomendação de doses de fósforo, sulfato, calcário e gesso haja vista sua determinação ser ainda mais simples que a do fósforo remanescente; todavia, a escala logarítmica do pH NaF faz com que sua capacidade de discriminação de solos seja muito menor que a do Prem; em outras palavras, pode-se dizer que dois solos que apresentem

valores próximos mas suficientemente distintos de Prem podem apresentar valores muito semelhantes de pH NaF. Apesar disso, Alves & Lavorenti (2006) observaram que o pH NaF foi capaz de substituir com vantagem o teor de argila como variável preditora do Prem em modelos de regressão linear múltipla.

2.2 Funções de pedotransferência

As funções de pedotransferência (FPT), em inglês denominadas de *pedotransfer functions*, constituem-se em equações e/ou conjuntos de equações que possibilitam estimar o valor de um atributo quantitativo do solo a partir dos valores de outros atributos de mais fácil ou rápida determinação (Budiman *et al.* 2003). Embora tais funções sejam principalmente utilizadas para a estimativa de propriedades hidráulicas do solo, aplicações das mesmas para estimativas de outras características físicas e químicas do solo podem também se encontradas na literatura (Borggaard *et al.* 2004, Silva *et al.* 2008).

O desenvolvimento de funções de pedotransferência, segundo Budiman *et al.* (2003), está relacionado a dois princípios: (1) eficiência e (2) incerteza. O princípio da eficiência diz respeito ao uso de preditores de obtenção mais fácil ou de menor custo do que a variável predita, uma vez que o objetivo da PTF é predizer propriedades cujas medidas ou determinações diretas são difíceis, laboriosas ou muito caras. Ainda segundo Budiman *et al.* (2003), as FPT que utilizam variáveis preditas que são de mais fácil obtenção que as preditoras somente são consideradas eficientes se a variável predita não é rotineira e se as variáveis preditoras estão disponíveis em relatórios e documentos já existentes. O princípio da incerteza está relacionado ao uso de FPT que possuam a incerteza quantificada, que pode ser tanto relacionada com os dados de entrada quanto ao modelo utilizado. Diferentes abordagens matemático-estatísticas podem ser utilizadas para desenvolver FPT e estabelecer relações entre variáveis preditoras e preditas, como por exemplo: redes neurais artificiais, regressão linear, modelos lineares generalizados, modelos aditivos generalizados, árvore de regressão, programação genética e sistema de lógica difusa.

2.2.1 REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS

A combinação de diversos neurônios é denominada de rede de neurônios ou rede neural e sua origem está fundamentada nos estudos do cérebro e de suas conexões sinápticas (Tafner *et al.* 1996). Os modelos neurais também são denominados na literatura por sistemas

conexionistas ou como processamento paralelo distribuído (PDP, de *parallel distributed processing*).

As redes neurais são sistemas compostos por unidades de processamento simples, também denominadas de nodos ou neurônios, dispostos em uma ou mais camadas e interligados por inúmeras conexões, que realizam cálculos de determinadas funções matemáticas (Braga *et al.* 2007). A rede extrai seu poder computacional de sua estrutura paralelamente distribuída e de sua habilidade de aprender por exemplos e, portanto de generalizar. O termo paralelamente distribuído é utilizado no sentido de que todos os neurônios da camada processam as suas entradas de modo simultâneo independente (Luger 2004).

As redes neurais artificiais (RNA) fazem parte do contexto da Inteligência Artificial, pois utilizam dispositivos computacionais para simular a capacidade humana de resolver problemas. Além disso, como qualquer outra técnica de Inteligência Artificial, as RNA têm a capacidade de armazenar o conhecimento, aplicar esse conhecimento armazenado para resolver problemas e adquirir novos conhecimentos por meio das experiências.

2.2.1.1 Histórico das redes neurais artificiais

Em 1943, McCulloch e Pitts publicaram um artigo que unificava os estudos da neurofisiologia e da lógica matemática. O primeiro modelo artificial de um neurônio foi fruto deste trabalho. O neurônio seguia a lei do “tudo-ou-nada”, ou seja, a função de ativação era do tipo limiar, com saída igual a 0, para valores de ativação negativo e 1 para valores de ativação positivo. Segundo eles, uma rede com um número suficiente de neurônios, com conexões sinápticas ajustadas e operando de forma síncrona, a princípio, realizaria qualquer função computável (Haykin 2001).

O trabalho de McCulloch e Pitts concentrou-se em descrever o modelo do neurônio e de suas capacidades computacionais, porém as técnicas de aprendizagem não foram abordadas. Alguns anos depois, em 1949, Donald Hebb propôs uma teoria para explicar o aprendizado em neurônios biológicos baseada no reforço das ligações sinápticas entre neurônios excitados (Braga *et al.* 2007). A teoria de Hebb, como é conhecida, foi testada matematicamente e atualmente é utilizada em vários algoritmos de aprendizagem.

Em 1958, Frank Rosenblatt, em seu trabalho sobre o *perceptron* demonstrou que se fossem acrescentadas sinapses ajustáveis, as RNAs poderiam ser treinadas para classificar certos tipos de padrões. O *perceptron* de Rosenblatt consiste em unidades de processamentos

conectadas unicamente a uma unidade de saída por meio de pesos sinápticos (Valença & Ludemir 1999). Além disso, Rosenblatt descreveu uma topologia de RNA, estruturas de ligações entre os neurônios e propôs também um algoritmo para treinar a rede.

Simultaneamente ao surgimento do *perceptron*, no final da década de 50, o modelo Adaline foi descrito por Bernard Widrow e Marcian Hoff e caracterizava-se por apresentar o algoritmo de treinamento baseado em minimização de erros, conhecido como Regra Delta.

O *perceptron* simples, assim denominado por ser de uma única camada, não era capaz de executar algumas tarefas. Em 1969, Minsky e Papert chamaram atenção para o fato de que o *perceptron* está limitado à resolução de problemas linearmente separáveis, não conseguindo detectar paridade, conectividade e simetria (Braga *et al.* 2007). São denominados problemas linearmente separáveis aqueles cuja solução somente pode ser obtida dividindo o espaço de entrada em duas regiões, através de uma superfície linear. Minsky e Papert descreveram ainda que qualquer uma das limitações do *perceptron* de camada única poderia ser superada na versão de múltiplas camadas (Haykin 2001).

Durante a década de 70 os estudos sobre as redes neurais diminuíram de intensidade. Em 1982, Hopfield chamou atenção para as propriedades associativas das RNA, através das redes recorrentes, também conhecidas como redes de Hopfield. A partir de meados da década de 80 houve uma nova explosão de interesses pelas RNA na comunidade internacional (Braga *et al.* 2007).

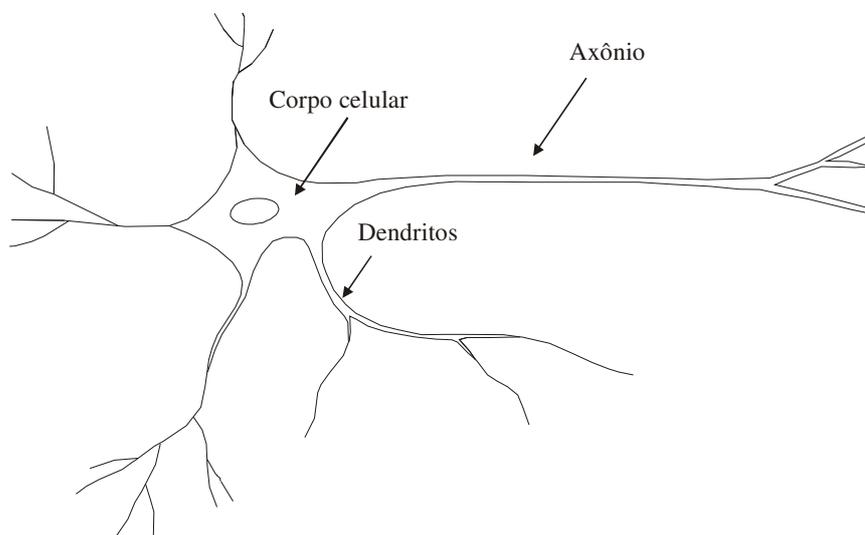
Em 1986, Rumelhart, Hinton e Williams descreveram o algoritmo de treinamento *backpropagation*, que emergiu como o algoritmo de aprendizagem mais popular para o treinamento de *perceptron* de múltiplas camadas (Haykin 2001). Após o surgimento do algoritmo *backpropagation* inúmeras pesquisas se voltaram a propor variações do algoritmo que tivessem maior velocidade de convergência.

2.2.1.2 Inspirações biológicas

O cérebro humano é formado por cerca de 10 bilhões de neurônios interconectados, que formam uma rede capaz de processar milhões de informações e realizar entorno de 60 trilhões de conexões sinápticas (Valença & Ludemir 1999). Portanto, o cérebro é um sistema de processamento de informações altamente complexo, não-linear e paralelo.

Os neurônios são variáveis em sua forma e tamanho em função da parte do cérebro em que se encontram. Mesmo não existindo dois neurônios iguais no cérebro humano, eles

apresentam características comuns. Os neurônios biológicos são formados por um corpo celular e por ramificações denominadas de dendritos e axônio (Figura 01).



*Figura 01 – Neurônio biológico.
Fonte: Adaptado de Ferneda (2006).*

Os dendritos recebem informações (impulsos nervosos) de outros neurônios e conduzem esses sinais das extremidades para o corpo celular. As informações são processadas no corpo celular e caso a soma de excitações e inibições ultrapasse um determinado limite o neurônio emite um impulso nervoso (Braga *et al.* 2007). Esses impulsos são transmitidos a outros neurônios através do axônio que é uma ramificação longa e geralmente única. As extremidades do axônio são conectadas com os dendritos de outros neurônios pelas sinapses, que tem papel fundamental na memorização de informações. As sinapses são capazes de controlar a transmissão de impulsos entre os neurônios da rede e podem também impor ao neurônio receptor excitação ou inibição. A conexão dos neurônios através das sinapses forma a rede neuronal biológica.

O conjunto de neurônios é responsável pela maioria das funções realizadas pelo nosso cérebro. A operação em paralelo de todos os neurônios do sistema nervoso faz com que o homem tenha capacidade de realizar problemas considerados complexos, como por exemplo, o reconhecimento de padrões (Braga *et al.* 2007), processo pelo qual um sinal recebido é atribuído a uma classe dentre um número determinado de classes (Haykin 2001).

2.2.1.3 Neurônio artificial

O neurônio artificial é a unidade de processamento da informação, elemento fundamental para a operação da rede neural artificial, porém ainda primitivo se comparado àqueles encontrados no cérebro (Haykin 2001). Os neurônios artificiais, bem como os neurônios biológicos, possuem conexões de entrada (dendritos), conexões de saída (axônio) e um processamento interno que gera um sinal de saída em função do sinal de entrada.

Os neurônios artificiais (Figura 02) consistem de:

- 1) sinais de entrada (x_1, x_2 e x_m) ou informações de entrada, que podem vir do ambiente ou da ativação de outros neurônios;
- 2) conjunto de pesos (w_{k1}, w_{k2}, w_{km}), que descrevem as forças de conexão, podendo ser positivos, representando ligações excitatórias ou negativos inibindo a ativação do neurônio, ou até mesmo nulo, quando não há conexão entre dois neurônios o peso sináptico é nulo;
- 3) função soma (Σ), que representa o somatório dos sinais de entrada ponderados pelos seus respectivos pesos, constitui um combinador linear;
- 4) função de ativação [$\varphi(\cdot)$], que restringe a amplitude da saída do neurônio, num intervalo normalizado entre $[0;1]$ ou $[-1;1]$;
- 5) sinal de saída (y_k), que é o resultado fornecido pelo neurônio.

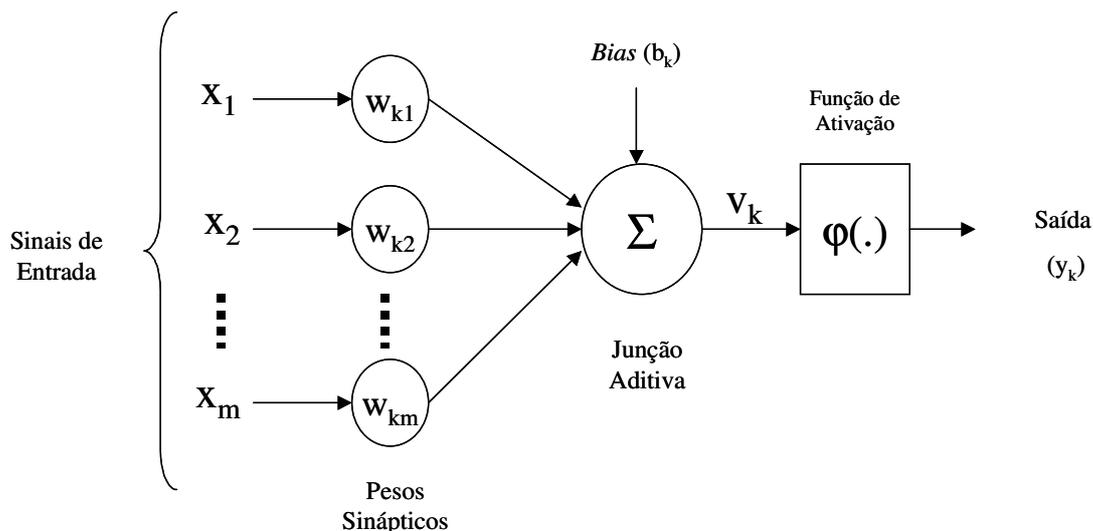


Figura 02 – Modelo não-linear de um neurônio artificial.
Fonte: Adaptado de Haykin (2001).

Cada informação de entrada tem um determinado peso associado, também denominado de peso sináptico, que representa matematicamente o seu grau de importância perante aquele neurônio (Tafner *et al.* 1996, Silva *et al.* 2004). Os sinais de entrada dos neurônios são multiplicados pelo seu peso sináptico, o somatório dessa resultante acrescido ao *bias* compõe a informação de entrada do neurônio (Equação 1).

$$v_k = \sum_{j=1}^n w_{kj} \cdot x_j + b_k \quad (1)$$

em que:

x_j : sinais de entrada;

w_{kj} : peso sináptico no neurônio k ;

b_k : *bias*;

v_k : saída do combinador linear do modelo.

O *bias* é um parâmetro externo ao neurônio, tem como função minimizar os erros quando os dados de entrada são nulos. Além disso, ele aumenta ou diminui a entrada líquida da função de ativação pelo fato de ser positivo ou negativo (Haykin 2001).

Além das redes neurais artificiais com pesos existem redes sem pesos, e neste último caso, o conhecimento fica armazenado na memória dos dispositivos em tabelas-verdade e o aprendizado consiste em modificar o conteúdo das memórias destas tabelas (Braga *et al.* 2007).

O valor de saída do combinador linear (v_k) será então comparado com valor limite para a ativação do neurônio, se o valor for superior, o neurônio se ativará, caso contrário ficará inativo. A função de ativação é de ordem interna do neurônio, crescente, contínua e funciona como um limitante à amplitude da saída do neurônio (Silva *et al.* 2004). A saída de um neurônio em termos do campo local induzido (ou potencial de ativação), definida pela função de ativação, tem uma amplitude normalizada no intervalo unitário fechado $[0;1]$ ou $[-1;1]$ (Haykin 2001).

Cada neurônio tem associado uma função de ativação, responsável pela intensidade do sinal a ser transmitido pelas conexões para os neurônios das camadas adjacentes (Valença & Ludemir 1999). As funções de ativação mais utilizadas são: linear, sigmóide, degrau e rampa (Figura 03).

A função de ativação linear é a função que não limita a saída da rede, é usada apenas para armazenar entrada e saída de dados. A função linear é apresentada na Equação (2), em que k é uma constante.

$$\varphi(v) = k.v \quad (2)$$

A função de ativação sigmóide é a função de ativação mais utilizada, assume um intervalo contínuo de valores entre 0 e 1, além disso, possui um balanceamento adequado entre o comportamento linear e não-linear (Haykin 2001).

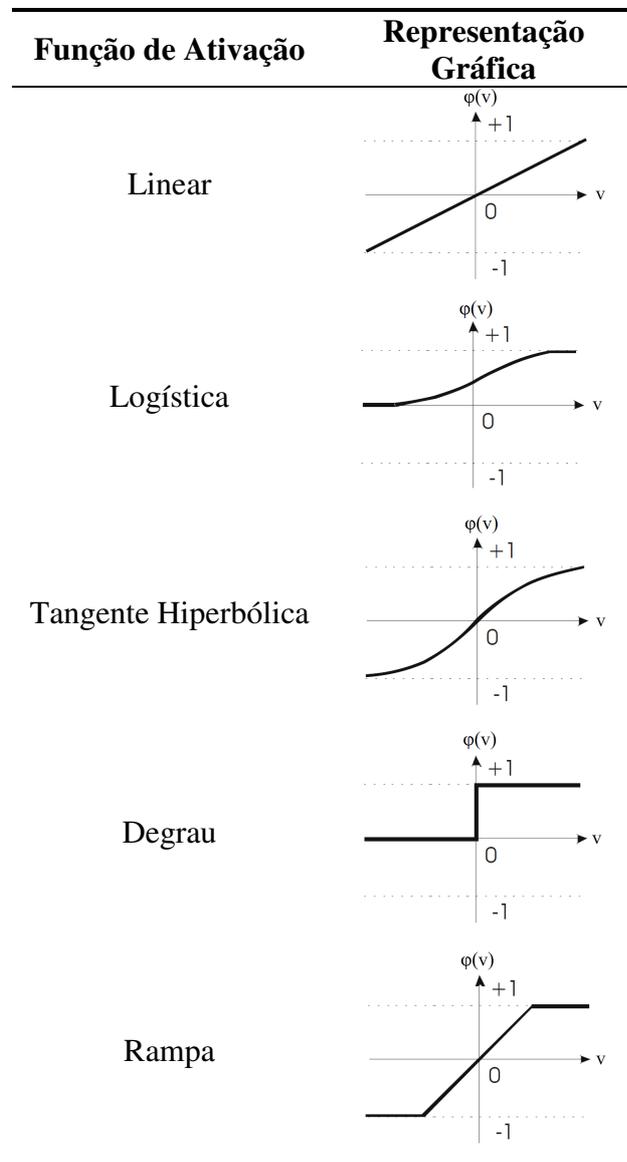


Figura 03 – Funções de ativação mais utilizadas.
Fonte: Adaptado de Haykin (2001) e Braga et al. (2007).

As funções de ativação sigmoidal são associadas ao uso de *perceptron* multicamadas (Braga *et al.* 2007). Tanto a função logística, descrita pela Equação (3), em que a é o parâmetro de inclinação, quanto a função tangente hiperbólica representada pela Equação (4) também são exemplos de função sigmóide. A diferença entre elas é que a função logística assume valores entre 0 e 1 e a função tangente hiperbólica assume valores entre -1 e +1.

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + \exp(-a \cdot v)} \quad (3)$$

$$\varphi(v) = \tanh(v) \quad (4)$$

A função de ativação do tipo degrau é também denominada de função limiar, define que a saída do neurônio será igual a 1 se o campo local induzido for uma valor não-negativo e 0 no caso contrário. A função de ativação do tipo rampa também é conhecida como função linear por partes, assume que o fator de amplificação dentro da região linear de operação é a unidade, ou seja, o valor de saída do neurônio será igual ao do campo local induzido se este estiver entre -0,5 e +0,5, se for maior ou igual que 0,5 a saída do neurônio será 1 e se for menor ou igual a -0,5 a saída será 0.

2.2.1.4 Arquitetura das redes

A arquitetura da rede, também denominada por topologia, define a forma como os neurônios estão organizados e sua configuração afeta o desempenho da rede neural. Mais especificadamente, a topologia está relacionada ao número de camadas da rede neural, quantidade de neurônios em cada uma das camadas, a ligação e o nível de conectividade entre os neurônios (Silva *et al.* 2004). As redes neurais podem ser divididas em três classes de arquitetura distintas (Figura 04): redes alimentadas adiante com camada única, redes alimentadas adiante com múltiplas camadas e redes recorrentes.

A rede alimentada adiante é formada por uma camada de entrada que se projeta sobre uma camada de saída e não o contrário (Haykin 2001). É denominada rede de camada única, pois apenas os neurônios da camada de saída possuem processamento associado. As redes alimentadas adiante com camadas múltiplas diferem das redes de camada única por apresentarem uma ou mais camadas de neurônios ocultas. Estas redes são consideradas estáticas, ou seja, as suas saídas em um determinado instante dependem apenas das entradas

atuais (Braga *et al.* 2007). As RNAs alimentadas adiante com múltiplas camadas são comumente designadas *perceptron* multicamadas. Tais redes são as mais difundidas na literatura e correspondem às que serão utilizadas neste estudo.

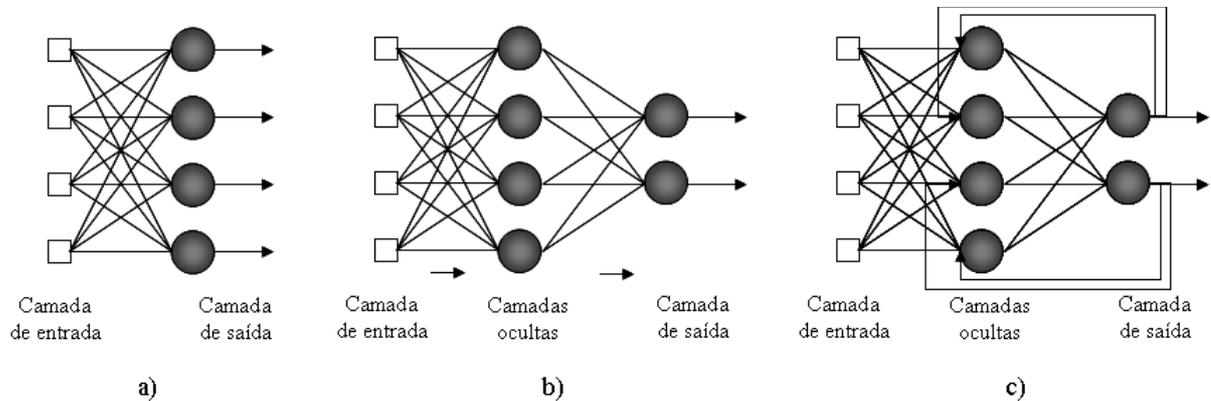


Figura 04 – Arquitetura das RNA: (a) rede alimentada adiante com camada única, (b) rede alimentada adiante com múltiplas camadas, (c) rede recorrente. Fonte: Adaptado de Haykin (2001).

Nas redes recorrentes, os sinais de saída dependem não somente dos sinais de entrada, mas também do seu valor atual (Braga *et al.* 2007). Tais redes podem ser formadas, por exemplo, por uma camada de neurônios, com cada um alimentando seu sinal de saída de volta para as entradas de todos os outros neurônios.

Uma rede neural pode ser completamente conectada, a situação na qual todos os neurônios de uma camada estão conectados com todos os neurônios da camada seguinte ou fracamente conectada quando não são estabelecidas todas as conexões possíveis (Haykin 2001).

A definição do número de camadas e de neurônios em cada camada é realizada por meio de uma inspeção prévia dos dados e da complexidade do problema. Após a seleção da arquitetura inicial da rede, refinamentos sucessivos são realizados de forma a se obter uma estrutura final mais adequada. Nesta etapa de ajustes, deve-se buscar uma topologia de rede que modele com precisão os dados do conjunto de treinamento, mas que apresente boa capacidade de generalização (Silva *et al.* 2004).

Na maioria dos problemas resolvidos por redes neurais utiliza-se apenas uma camada intermediária, porém se a função a ser aproximada apresenta descontinuidades, então há a necessidade de utilizar duas camadas intermediárias (Braga *et al.* 2007). A utilização de um número de camadas maior do que o necessário leva a problemas de dificuldade de convergência global da rede, uma vez que as camadas intermediárias trabalham com estimativas de erro.

Alguns fatores influenciam no número de neurônios na camada intermediária, como por exemplo: número de exemplos de treinamento; quantidade de ruídos presentes nos exemplos, ou seja, erros associados à obtenção dos dados; complexidade da função a ser aprendida e distribuição estatística dos dados de treinamento (Silva *et al.* 2004). A determinação do número de neurônios em cada camada e conseqüentemente a complexidade da rede deve ser condizente com a complexidade do problema a ser resolvido. Na maioria dos estudos, a complexidade do problema não é conhecida, fazendo com que se defina uma quantidade mínima de neurônios, acrescentando ou diminuindo gradativamente até se alcançar o objetivo, que é a minimização do erro médio quadrático do conjunto de treinamento (Braga *et al.* 2007).

2.2.1.5 *Perceptron multicamadas*

O *perceptron* multicamadas também denominado de *multilayer perceptron* (MLP) é constituído por no mínimo três camadas de neurônios: entrada, intermediária/oculta e saída. Na camada de entrada os neurônios recebem excitações externas não ocorrendo nenhum tipo de processamento. Nesta camada as informações são apenas armazenadas para serem enviadas às camadas seguintes. As camadas intermediárias/ocultas se localizam entre a camada de entrada e a camada de saída, são compostas por neurônios, os responsáveis pelo poder computacional da rede. Por sua vez, a camada de saída é responsável pela resposta da rede. Além de conter uma ou mais camadas de neurônios ocultos, cada neurônio da rede MLP deve incluir uma função de ativação não-linear, como por exemplo, a função sigmoideal (Braga *et al.* 2007, Haykin 2001).

O *perceptron* multicamadas apresenta um poder computacional maior do que aquele apresentado pelas redes sem camadas intermediárias, podendo implementar qualquer função seja ela linearmente separável ou não (Braga *et al.* 2000, Silva *et al.* 2004). No *perceptron* simples, sem camadas intermediárias, o processamento está atribuído apenas à camada de saída da rede e a rede está limitada à resolução de problemas com características lineares.

A Figura 05 apresenta a arquitetura de uma rede MLP de topologia [2 4 4 2], com dois neurônios na camada de entrada, duas camadas intermediárias de quatro neurônios cada uma e dois neurônios na camada de saída. Com relação às conexões, tal arquitetura é denominada completamente conectada.

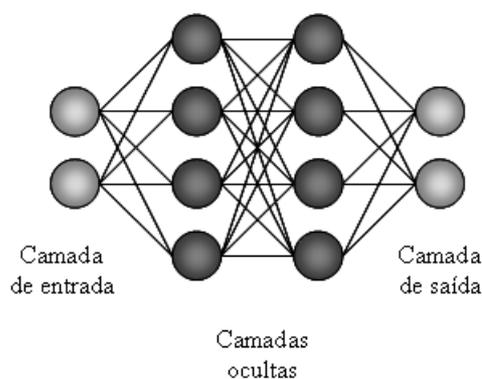


Figura 05 – Rede MLP com topologia [2 4 4 2]. Fonte: Haykin (2001).

2.2.1.6 Processo de aprendizagem

As RNAs possuem a capacidade de aprender por exemplos, extraindo automaticamente as características necessárias, que serão utilizadas posteriormente para gerar respostas ao problema (Braga *et al.* 2000). A habilidade da rede em aprender e generalizar, produzir saídas adequadas para entradas que não estavam presentes durante o treinamento, possibilita as RNAs resolverem problemas complexos, que são atualmente de difícil solução (Haykin 2001).

O aprendizado de uma rede consiste basicamente de um processo de ajuste dos pesos sinápticos, que ao final do processo armazenam o conhecimento adquirido pela rede. Em outras palavras, o aprendizado está relacionado com a melhoria do desempenho da rede utilizando algum critério conhecido, como por exemplo, o erro quadrático médio associado a algoritmos de correção de erro.

O conjunto de regras bem definidas que faz com que a rede aprenda uma determinada função é denominado de algoritmo de aprendizagem (Silva *et al.* 2004). Existem vários algoritmos de aprendizagem ou de treinamento, os quais podem ser divididos em dois grupos: aprendizado supervisionado e aprendizado não-supervisionado.

Aprendizado Não-supervisionado

O aprendizado não-supervisionado ocorre sem o auxílio de um professor, onde somente os padrões de entrada são fornecidos para a rede. A regularidade e redundância dos dados de entrada são características essenciais para este tipo de aprendizado (Braga *et al.* 2007). Sua

aplicação está em problemas que visam à descoberta de características estatisticamente relevantes, como a identificação de agrupamentos e classes.

O aprendizado por competição e o aprendizado Hebbiano são exemplos de aprendizado não-supervisionado. No primeiro caso, os neurônios de saída da rede competem entre si para se tornar ativos (disparar). O segundo caso é descrito pela seguinte regra: “se dois neurônios em ambos os lados de uma sinapse (conexão) são ativados simultaneamente então a força daquela sinapse é seletivamente aumentada” (Haykin 2001).

Aprendizado Supervisionado

O aprendizado supervisionado ocorre com o auxílio de um professor que fornece as entradas e saídas com o objetivo de ajustar os parâmetros da rede. Desta forma, o conhecimento do ambiente disponível ao professor é transferido para a rede através do treinamento (Haykin 2001).

O aprendizado por correção de erros é o exemplo mais típico de aprendizado supervisionado, em que se busca minimizar o erro da resposta da rede em relação à saída desejada (Braga *et al.* 2007). A minimização do erro é alcançada através de uma função de custo ou índice de desempenho, o que resulta na regra de aprendizagem denominada de Regra Delta (Haykin 2001).

A Regra Delta está baseada numa superfície de erro, que representa o erro acumulativo sobre um conjunto de dados, como uma função dos pesos da rede (Luger 2004). Cada ponto sobre a superfície de erro está associada a uma configuração de pesos. Tendo um conjunto de pesos, busca-se uma direção sobre esta superfície que reduza o erro o mais rápido possível. Essa abordagem é denominada aprendizagem por descida do gradiente.

A aplicação do erro quadrado médio (*EQM*) ou a soma dos erros quadrados (Equação 5) sobre a amostra de treinamento pode ser utilizado como uma medida de desempenho do sistema quando se utiliza algoritmos de correção de erros.

$$J = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p (y_d^i - (w \cdot x^i))^2 \quad (5)$$

em que:

x^i : é a informação de entrada;

y_d^i : informação de saída;

w: peso sináptico.

O aprendizado supervisionado se aplica principalmente aos problemas de aproximação, como é o caso deste estudo, onde um conjunto de exemplos é fornecido com o objetivo de mapear a função desconhecida que relaciona os dados de entrada com os dados de saída. O conjunto de treinamento deve ser grande o suficiente para que o erro aproximativo seja pequeno (Haykin 2001). O erro aproximativo é a diferença entre a função desconhecida e a função que descreve o mapeamento de entrada-saída.

2.2.1.7 Algoritmo de aprendizagem *backpropagation*

O algoritmo de aprendizagem supervisionado mais popular é o *backpropagation*, também conhecido como algoritmo de retropropagação de erros. Ele é a generalização da Regra Delta para redes de múltiplas camadas e utiliza a mesma abordagem de descida de gradiente. Baseia-se no uso do gradiente descendente para estimar o erro das camadas intermediárias por meio de uma estimativa do efeito que estas causam no erro da camada de saída (Haykin 2001). O gradiente descendente tem como objetivo a determinação de um mínimo global, por meio de incrementos dos valores dos pesos por uma quantidade que é proporcional à primeira derivada (gradiente) do erro entre o valor desejado e o valor calculado pela rede (Silva *et al.* 2004). O mínimo global é a solução teórica ideal, que apresenta o menor erro possível. No entanto, a rede pode cair também num mínimo local, não produzindo uma saída satisfatória ao sistema.

O treinamento de algoritmos *backpropagation* é realizado em duas fases: *forward* e *backward* (Braga *et al.* 2007). A fase *forward* define a saída para um dado padrão de entrada e tem como objetivo obter o erro da saída após a propagação do sinal por todas as camadas da rede. Na fase *backward*, o erro da camada de saída é utilizado para atualizar os pesos de suas conexões através do gradiente descendente. O fluxo de processamento segue da entrada para a saída, na fase *forward* e no sentido contrário para a fase *backward*.

A atualização dos pesos pode ser realizada por duas formas: seqüencial ou por lote. No primeiro caso a atualização é realizada após a apresentação de cada exemplo de treinamento enquanto no segundo caso após a apresentação de todo o conjunto de treinamento. Denomina-se ciclo ou época, a apresentação completa de todo o conjunto de treinamento (Haykin 2001).

O modo seqüencial de aprendizagem por retropropagação é computacionalmente mais rápido que o método por lote, principalmente se o conjunto de treinamento for grande e constituído por informações repetitivas (Haykin 2001). Já, na atualização por lote, dados redundantes causam problemas computacionais.

O *perceptron* multicamadas com treinamento supervisionado, por meio do algoritmo *backpropagation*, tem sido aplicado com sucesso para resolver inúmeros problemas (Haykin 2001). Em algumas aplicações, como por exemplo, problemas complexos e de grandes redes, o treinamento por meio do algoritmo *backpropagation* é lento. Em função dessa limitação, várias modificações foram realizadas para acelerar o seu tempo de treinamento e aumentar seu desempenho. As variações mais utilizadas do algoritmo *backpropagation*, segundo Braga *et al.* (2007), são: *backpropagation* com *momentum*, *quickprop*, *Levenberg-Marquardt*, *momentum* de segunda ordem, *Newton*, *resilient backpropagation* e *MOBJ*.

Algoritmo Levenberg-Marquardt

Ao contrário do algoritmo de treinamento *backpropagation*, que é baseado no método do gradiente descendente, o algoritmo Levenberg-Marquardt é uma aproximação do método de Newton, ele melhora o método Gauss-Newton por meio da utilização de uma taxa de aprendizado variável (Braga *et al.* 2007). O ajuste dos pesos da rede é realizado por lote de acordo com a Equação (6):

$$\Delta w_{ji}(t) = -[\nabla^2 E(w_{ji}(t)) + \mu I]^{-1} \nabla E(w_{ji}(t)) \quad (6)$$

em que:

$\nabla^2 E(w_{ji}(t))$: matriz Hessiana;

$\nabla E(w_{ji}(t))$: gradiente.

O parâmetro μ é multiplicado por um fator β quando um ajuste tem por objetivo o aumento de $E(w_{ji}(t))$. Quando o objetivo é reduzir o valor de $E(w_{ji}(t))$ a cada passo, μ é dividido por β . Quando é utilizado um valor grande para μ , o algoritmo se torna gradiente descendente (com passo $1/\mu$). Quando o valor escolhido para μ é baixo, o algoritmo é equivalente ao algoritmo Gauss-Newton (Braga *et al.* 2007).

Algoritmo resilient backpropagation

O *resilient backpropagation* é um algoritmo de adaptação global que realiza treinamento supervisionado por lote, procurando eliminar a influência negativa do valor da derivada parcial na definição do ajuste de pesos. A influência negativa ocorre porque, quando a saída de um neurônio for próxima de 0 (ou 1) e a saída desejada for 1 (ou 0), a derivada será próxima de 0, fazendo com que os pesos deste neurônio recebam um ajuste mínimo, próximo de 0 (Braga *et al.* 2007).

O algoritmo elimina esse problema utilizando apenas o sinal da derivada, e não o seu valor, indicando a direção do ajuste dos pesos (aumentar ou diminuir o peso anterior). O tamanho do ajuste dos pesos é dado por um “valor de atualização”, conforme indicado pela Equação (7).

$$\Delta w_{ji}(t) = \left\{ \begin{array}{l} -\Delta_{ji}(t), \text{ se } \frac{\partial E}{\partial w_{ji}}(t) > 0 \\ +\Delta_{ji}(t), \text{ se } \frac{\partial E}{\partial w_{ji}}(t) < 0 \\ 0, \text{ se } \frac{\partial E}{\partial w_{ji}} = 0 \end{array} \right\} \quad (7)$$

O valor de atualização Δ_{ji} é definido por um processo de adaptação que depende do sinal da derivada do erro com relação ao peso a ser ajustado, conforme indicado pela Equação (8):

$$\Delta w_{ji}(t) = \left\{ \begin{array}{l} \eta^+ \Delta_{ji}(t-1), \text{ se } \frac{\partial E(t-1)}{\partial w_{ji}} \frac{\partial E(t)}{\partial w_{ji}} > 0 \\ \eta^- \Delta_{ji}(t-1), \text{ se } \frac{\partial E(t-1)}{\partial w_{ji}} \frac{\partial E(t)}{\partial w_{ji}} < 0 \\ \Delta_{ji}(t-1), \text{ se } \frac{\partial E}{\partial w_{ji}} = 0 \end{array} \right\} \quad (8)$$

em que:

$$0 < \eta^- < 1 < \eta^+ .$$

Segundo a regra de adaptação utilizada pelo *resilient backpropagation*, quando a derivada parcial do erro em relação a um peso w_{ji} mantém o seu sinal, o que indica que seu último ajuste reduziu o erro cometido, o valor de atualização Δ_{ji} é aumentado pelo fator η^+ , acelerando a convergência do treinamento. Quando a derivada parcial muda de sinal, o que indica que o seu último ajuste foi grande demais, o valor de atualização Δ_{ji} é reduzido pelo fator η^- , mudando a direção do ajuste.

2.2.1.8 Etapa de treinamento

O desenvolvimento da rede neural envolve as etapas de treinamento e validação. O treinamento da rede consiste no cálculo das saídas a partir dos dados de entrada, comparação entre os dados de saída calculados pela rede e os medidos e ajuste dos pesos para diminuir a diferença entre os valores calculados e medidos (Agyare *et al.* 2007).

Para obter bons resultados na etapa de treinamento e validação, os dados de entrada e saída devem passar por uma etapa de pré-processamento, que consiste principalmente na normalização dos dados. Este procedimento evita a saturação dos neurônios, permitindo a ponderação de todos os sinais de entrada de forma equivalente. A saturação ocorre quando o neurônio recebe valores muito elevados, o que leva à função de ativação a trabalhar em sua região assintótica, causando pouca diferenciação dos valores de entrada durante o processamento. De acordo com LenCun (1993) apud Haykin (2001), a normalização é realizada para que o valor médio calculado sobre todo o conjunto de treinamento, ou seja, próximo de zero ou pequeno se comparado ao seu desvio padrão. Os intervalos de normalização mais usuais são [0;1] e [-1;1], contudo outros intervalos podem ser adotados para realizar a normalização.

Além da normalização, outro procedimento importante é a divisão do conjunto de dados em conjunto de treinamento e validação, que auxilia a evitar o *overfitting*, fenômeno que surge após certo tempo de treinamento, quando a rede memoriza os dados de treinamento. Redes superdimensionadas (com um número elevado de neurônios) podem resultar em *overfitting* e redes subdimensionadas em *underfittig*. O conjunto de treinamento é formado por pares de entrada-saída, onde os sinais de entrada possuem um sinal de saída correspondente. Os valores de saída são utilizados para ajustar os pesos da rede.

Uma RNA adequadamente treinada tem capacidade de generalização, ou seja, aprender por meio de um conjunto de exemplos e apresentar respostas adequadas para dados

de entrada não compreendidos no conjunto de treinamento. Quando uma rede é treinada em excesso, ou seja, quando o número de ciclos na etapa de treinamento é elevado, ela perde a habilidade de generalizar entre padrões de entrada-saída similares. Portanto, a generalização é influenciada pelo tamanho do conjunto de treinamento, pela arquitetura da rede e pela complexidade física do problema em questão (Haykin 2001).

O treinamento da rede neural busca encontrar o mínimo global, ou seja, a solução com o menor erro. A taxa de aprendizagem controla a velocidade de leitura, a qual corresponde à taxa de convergência entre a solução atual e o mínimo global (Valença & Ludermir 1999). Quanto maior for a taxa de aprendizagem, mais rapidamente os pesos se movem em direção a um valor ótimo (Luger 2004). Porém, para valores muito elevados, o algoritmo pode passar do mínimo ou oscilar em torno dos pesos ótimos, e para valores muito baixos a rede não vai aprender tão rapidamente. O termo momento pode ser adicionado para atuar o aumento da taxa de aprendizagem, sem que ocorram oscilações, e também para atuar no aumento da velocidade de convergência (Valença & Ludermir 1999).

2.2.1.9 Etapa de validação

A etapa de validação consiste em fornecer para a rede treinada, um conjunto de pares entrada-saída, diferentes dos utilizados no conjunto de treinamento. O conjunto de validação é utilizado para estimar a capacidade de generalização da rede durante o processo de aprendizagem e selecionar o modelo adequado (Braga *et al.* 2007). Esse conjunto deve ser uma amostra representativa do problema em estudo e os pesos sinápticos utilizados são aqueles cuja rede apresentou o melhor desempenho.

Após a etapa de treinamento e validação, a rede pode ser utilizada para gerar respostas a outros conjuntos de informações, pois todas as informações do conjunto de treinamento estão armazenadas nos neurônios após o ajuste de seus pesos sinápticos.

2.2.1.10 Aplicações de redes neurais

O uso de redes neurais artificiais se aplica a problemas que possuem dados disponíveis, pois através deles a rede ajusta seus parâmetros para executar determinada tarefa. As principais tarefas nas quais as RNAs são empregadas são:

- **classificação:** que consiste em atribuir a um padrão desconhecido uma entre várias classes conhecidas;

- **categorização:** que envolve a descoberta de categorias ou classes nos dados de entrada;
- **aproximação:** que consiste em mapear funções contínuas das variáveis de entrada;
- **previsão:** que se caracteriza em estimar situações futuras com base nos estados atuais e anteriores; e,
- **otimização:** que consiste em minimizar ou maximizar uma função de custo.

O uso das redes neurais artificiais se aplica a diversas áreas do conhecimento, tais como, engenharia de transportes, geociências, ciência do solo, etc. Os estudos na área de ciência do solo utilizam RNAs para predizer características hidráulicas do solo, como por exemplo, a condutividade hidráulica saturada (Agyare *et al.* 2007, Jana *et al.* 2007, Parasuraman *et al.* 2007, Parasuraman *et al.* 2006); características químicas como o teor de carbono orgânico do solo (Somaratne *et al.* 2005); e desenvolvimento de funções de pedotransferência (Zacharias & Wessolek 2007, Parasuraman *et al.* 2007; Jana *et al.* 2007). O uso de RNA se aplica também à estimativas da temperatura da superfície do solo a partir de imagens de satélite (Veronez *et al.* 2006).

A condutividade hidráulica, dentre outras propriedades edáficas, é importante para o desenvolvimento de modelos hidrológicos. Muitos estudos utilizam redes neurais para estimar a condutividade hidráulica saturada dos solos. Além de variáveis de fácil obtenção, os atributos do terreno (como por exemplo, perfil de curvatura, elevação, declividade, índice de escoamento superficial) também podem ser utilizados em RNA para estimar o parâmetro supracitado (Agyare *et al.* 2007). Segundo Agyare *et al.* (2007), o uso adicional de atributos do terreno pode melhorar o desempenho do modelo aprimorando com isso a estimativa da condutividade hidráulica.

Somaratne *et al.* (2005) também utilizaram atributos do terreno (elevação e declividade), além da temperatura e da precipitação média anual para estimar o teor de carbono orgânico em amostras de solo sob diferentes usos. No estudo, comparou-se o desempenho das RNAs com o da regressão múltipla (RLM). Os resultados mostraram que a depender da forma de carbono considerada (total ou lábil) um procedimento de desenvolvimento (RNA ou RLM) pode ser mais indicado. Por meio de funções de pedotransferência (FPT), podem-se estimar características do solo utilizando outros parâmetros disponíveis ou de mais fácil obtenção. Jana *et al.* (2007) treinou redes neurais utilizando dados de textura e densidade do solo disponíveis em um banco de dados em escala 1:24.000, com o objetivo de desenvolver uma função de pedotransferência para predizer o conteúdo de água para diferentes cargas hidráulicas em escala pontual. Neste estudo, as

curvas de retenção de água construídas pela RNA apresentaram-se semelhantes aquelas observadas em campo.

No estudo de Parasuraman *et al.* (2007), o uso de RNA foi comparado ao da programação genética (PG), para o desenvolvimento de uma FPT com o objetivo de estimar a condutividade hidráulica do solo. As variáveis preditoras utilizadas neste estudo foram: a densidade e os teores de areia, silte e argila dos solos. Os resultados do estudo mostraram que na etapa de treinamento a RNA apresentou um desempenho melhor comparado à PG em relação aos parâmetros: raiz quadrada do erro médio (RQEM), erro relativo médio absoluto (ERMA), residual médio (RM) e estimativa de incerteza. Durante a etapa de testes, os dois modelos apresentaram valores de condutividade hidráulica superestimados.

A simulação da contaminação de águas subterrâneas por substâncias químicas também pode ser desenvolvida utilizando RNA. Utilizando a profundidade do aquífero, a recarga e matéria orgânica Wang *et al.* (2006) estudaram a distribuição espacial da poluição de águas subterrâneas por nitrato. O desempenho da rede foi mensurado por meio do coeficiente de determinação e da raiz quadrada do erro médio. Neste estudo, a RNA com arquitetura [4 7 1], algoritmo de aprendizagem *backpropagation* e taxa de aprendizagem 0,02, apresentou bom desempenho, $R^2 = 0,77$ e $RQEM = 2,93 \text{ mg L}^{-1}$, na etapa de validação para concentrações de nitrato entre 5-10 mg L^{-1} , num raio de 400 m.

3 CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

A área de estudo compreendida neste trabalho foi o Estado de São Paulo (Figura 06), situado na região sudeste do Brasil, e que têm como limites os estados de Minas Gerais (N e NE), Rio de Janeiro (NE), Paraná (S), Mato Grosso do Sul (W) e o oceano Atlântico (E). O Estado é formado por 645 municípios e ocupa uma área total de 248.209,426 km² (IBGE 2009).

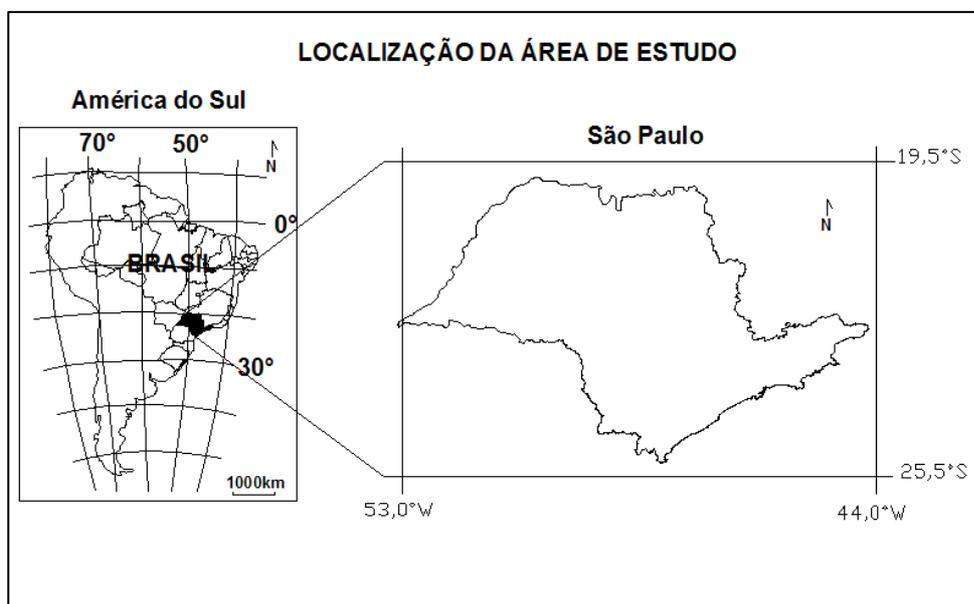


Figura 06 – Localização da área de estudo.

De acordo com o mapa pedológico do estado de São Paulo (Oliveira *et al.* 2002), as classes de solo nele ocorrentes correspondem às dos Argissolos, Cambissolos, Chernossolos, Espodosolos, Gleissolos, Latossolos, Neossolos, Nitossolos, Organossolos e Planossolos, com predominância dos Latossolos e Argissolos. As características das principais classes de solo e suas ocorrências no Estado de São Paulo estão apresentadas na Tabela 01.

Tabela 01 – Características dos solos e classes de ocorrência no Estado de São Paulo.

Classes de Solo ⁽¹⁾	Características ⁽²⁾
Argissolos Vermelhos Argissolos Vermelho- Amarelos	Os Argissolos são constituídos por material mineral e apresentam horizonte B textural composto de argila de baixa atividade.
Cambissolos Háplicos Cambissolos Húmicos	Os Cambissolos são solos caracterizados por apresentar o horizonte B incipiente. Apresentam-se em processo de transformação, com fragmentos de rocha em seu perfil, caracterizando um baixo grau de intemperismo.

Classes de Solo ⁽¹⁾	Características ⁽²⁾
Chernossolos Argilúvicos	Os Chernossolos são solos ricos em matéria orgânica e apresentam uma coloração escura. Apresentam horizonte A chernozênico, com argilas de atividade alta e alta saturação por bases. Estes solos dependem de condições que favoreçam a formação e permanência de um horizonte rico em matéria orgânica, elevada concentração de cálcio, magnésio e a presença de argilominerais 2:1.
Espodossolos Ferrocárbicos	Os Espodossolos são solos que apresentam horizonte B espódico, com acumulação iluvial de matéria orgânica, associados os complexos de sílica-alumínio ou húmus-alumínio. São pobres em fertilidade, sendo originados de materiais arenoquartzosos sob umidade elevada, em clima tropical ou subtropical e relevo plano.
Gleissolos Háplicos Gleissolos Melânicos Gleissolos Sálcos	Os Gleissolos são solos hidromórficos, apresentando-se permanentemente ou periodicamente saturados por água.
Latossolos Amarelos Latossolos Brunos Latossolos Vermelhos Latossolos Vermelho-Amarelos	Os Latossolos são solos constituídos por material mineral e que apresentam um horizonte B latossólico. São solos em estágio avançado de intemperização, muito evoluídos, e destituídos de minerais primários ou secundários menos resistentes.
Neossolos Flúvicos Neossolos Litólicos Neossolos Quartzênicos	Os Neossolos são os solos novos e por isso não apresentam alterações expressivas em relação ao material de origem, seja pela sua maior resistência ao intemperismo ou devido a fatores de formação (relevo, clima ou tempo) que podem limitar ou impedir a evolução dos solos.
Nitossolos Vermelhos	Os Nitossolos são solos que apresentam o horizonte B nítico, caracterizado por pouco ou nenhum incremento de argila do horizonte superficial para o subsuperficial.
Organossolos Tiomórficos Organossolos Mésicos	Os Organossolos são solos de constituição orgânica, formados em ambientes com grande umidade.
Planossolos Háplicos	Os Planossolos são solos desenvolvidos com encharcamento superficial estacional. São caracterizados por apresentar horizonte B plânico.

⁽¹⁾ De acordo com Oliveira *et al.* (2002). ⁽²⁾ Características extraídas de EMBRAPA (2006) e Streck *et al.* (2008).

4 MATERIAL E MÉTODOS

O desenvolvimento deste trabalho foi realizado por meio de uma parceria entre o Programa de Pós-Graduação em Geologia da Universidade do Vale do Rio dos Sinos (PPGeo/Unisinos) e a Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” da Universidade de São Paulo (ESALQ/USP). As atividades de amostragens e análises dos solos foram realizadas pela extinta seção de pedologia do Instituto Agrônomo de Campinas (IAC), que disponibilizou tais informações e também amostras de solo ao Departamento de Ciências Exatas da ESALQ/USP, no qual foram efetuadas as medidas de pH em solução de fluoreto de sódio e de fósforo remanescente.

4.1 Amostragem e análise dos solos

Foram utilizadas 117 amostras de solo coletadas no Estado de São Paulo, sendo 84% provenientes de horizontes subsuperficiais (horizonte B) e 16% de horizontes superficiais (horizonte A). Anteriormente à determinação laboratorial dos atributos químicos, físicos, eletroquímicos e mineralógicos, as amostras foram secas ao ar, destorroadas e passadas em peneira de 2 mm de abertura de malha para a obtenção da fração TFSA.

4.1.1 CARACTERIZAÇÃO FÍSICA

As amostras foram caracterizadas quanto aos teores das frações granulométricas: areia, por meio de peneiramento úmido; silte e argila, empregando-se o método da pipeta (EMBRAPA 1997). A fração areia total, que compreende grãos de diâmetro médio (ϕ_m) entre 0,053 a 2,00 mm, foi subdividida em areia grossa ($\phi_m = 0,210$ a 2,000 mm) e areia fina ($\phi_m = 0,053$ a 0,210 mm). A fração silte e argila correspondem, respectivamente, aos grãos de diâmetro médio entre 0,002 a 0,053 mm e menor que 0,002 mm.

4.1.2 CARACTERIZAÇÃO QUÍMICA E MINERALÓGICA

As amostras foram caracterizadas quanto aos valores de fósforo remanescente (Prem) (Alvarez V. *et al.* 2000), aos teores de carbono oxidável (C), aos teores trocáveis de cálcio (Ca^{2+}), magnésio (Mg^{2+}), potássio (K^+), sódio (Na^+) e alumínio (Al^{3+}) e à acidez total (H +

Al) empregando-se os procedimentos descritos em Raij *et al.* (2001). A partir desses teores foram calculadas a soma de bases ($SB = Ca^{2+} + Mg^{2+} + K^+ + Na^+$), a capacidade de troca catiônica potencial (T) [$T = Ca^{2+} + Mg^{2+} + K^+ + (H+Al)$] e as saturações por bases (V%) [$V = 100 (Ca^{2+} + Mg^{2+} + K^+ + Na^+) / (T)$] e por alumínio (m%) [$m = 100 Al^{3+} / (Ca^{2+} + Mg^{2+} + K^+ + Na^+ + Al^{3+})$].

Os teores totais de ferro, alumínio e silício vinculados aos minerais secundários como vermiculita, caulinita, gibbsita, hematita, maghemita e goethita foram determinados após o ataque sulfúrico das amostras segundo EMBRAPA (1997) e expressos sob a forma dos óxidos Fe_2O_3 , Al_2O_3 e SiO_2 , respectivamente. A partir desses valores foram calculados os índices de intemperismo K_i ($K_i = SiO_2 / Al_2O_3$, mol mol⁻¹) e K_r [$K_r = 1,7 SiO_2 / (Al_2O_3 + Fe_2O_3)$, mol mol⁻¹].

4.1.3 CARACTERIZAÇÃO ELETROQUÍMICA

Em relação aos atributos eletroquímicos, foram medidos os valores de pH em água (pH H₂O) e em solução de KCl 1 mol L⁻¹ (pH KCl) (EMBRAPA 1997). A partir dos valores de pH medidos em água e em solução KCl foram calculados os valores do índice ΔpH , o qual corresponde à diferença entre os valores de pH KCl e pH H₂O (Mekaru & Uehara 1972). Adicionalmente, foram determinados os valores de pH em solução de NaF 1 mol L⁻¹ (pH NaF) (Bolland *et al.* 1996).

4.2 Desenvolvimento da função de pedotransferência

Diversos modelos matemáticos podem ser utilizados para desenvolver funções de pedotransferência e estabelecer relações entre variáveis preditoras e preditas. Neste estudo, a função de pedotransferência (FPT) foi concebida por meio de redes neurais artificiais (RNA) para estimar o Prem em amostras de solo do Estado de São Paulo. Posteriormente, a mesma FPT foi desenvolvida por meio de análise de regressão linear múltipla, como uma forma de avaliar os resultados obtidos por meio das redes neurais. O desenvolvimento da FPT foi realizado de forma a alcançar os dois princípios descritos por Budiman *et al.* (2003), o da eficiência e o da incerteza.

A rede neural artificial foi gerada através da ferramenta *neural network toolbox* do programa MATLAB versão 7.0.1. Foi utilizada uma rede neural multicamadas, onde os dados de entrada e saída foram métricos, ou seja, quantitativos. As variáveis de entrada da rede

consistiram em atributos físicos, químicos, eletroquímicos e mineralógicos de solos amostrados no Estado de São Paulo, e a variável de saída foi única, a concentração de fósforo remanescente nos solos. As etapas desenvolvidas na implementação da função de pedotransferência para estimar o Prem nos solos, por meio de RNA, estão apresentadas na Figura 07 e descritas nos itens a seguir.

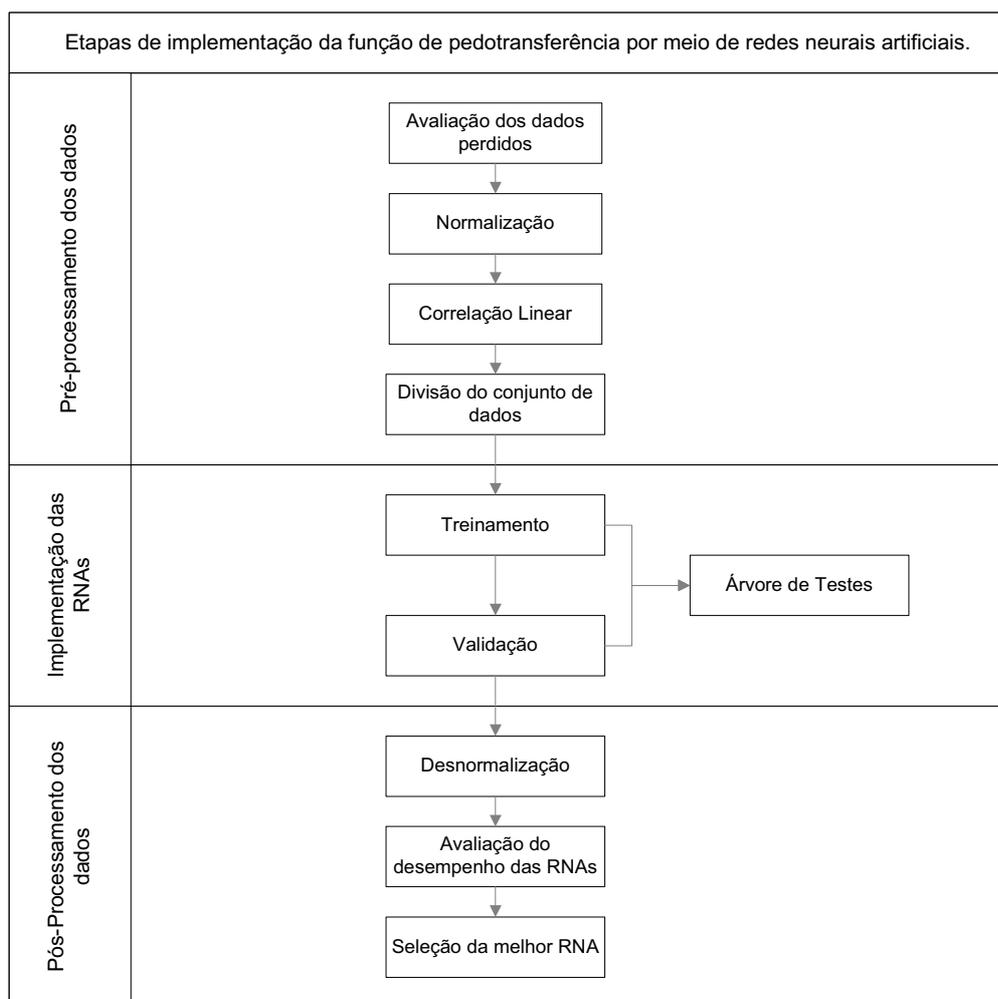


Figura 07 – Etapas da implementação de uma função de pedotransferência para estimar o fósforo remanescente por meio de redes neurais artificiais.

4.2.1 PRÉ-PROCESSAMENTO DOS DADOS

A etapa de pré-processamento de dados consistiu da avaliação dos dados perdidos, a normalização dos dados, a análise de correlação linear e a partição dos dados em conjunto de treinamento e validação.

4.2.1.1 Avaliação dos dados perdidos

A avaliação dos dados perdidos foi realizada por intermédio de uma inspeção visual sobre o conjunto de informações disponibilizadas pelo IAC. Foram considerados “dados perdidos” todas as informações faltantes de uma amostra de solo sobre as quais outras informações estavam disponíveis (Hair *et al.* 2005). Existem procedimentos corretivos para lidar com dados perdidos, como por exemplo, a substituição pelo valor médio do atributo. Porém, neste estudo, optou-se pela eliminação das amostras de solo que continham dados perdidos.

4.2.1.2 Normalização

Os valores de entrada e de saída da rede foram normalizados no intervalo entre [0;1] para o uso da função sigmoideal logística e entre [-1;1] para o uso da função de ativação sigmoideal tangente hiperbólica. A normalização dos valores entre [0;1] foi realizada de acordo com a Equação (9) e entre [-1;1] de acordo com a Equação (10), ambas baseadas nos valores máximos e mínimos, denominada de normalização linear.

$$norm = \frac{real - min}{max - min} \quad (9)$$

$$norm = \left(\frac{2 \times (real - min)}{(max - min)} \right) - 1 \quad (10)$$

em que:

norm: valor normalizado no intervalo entre [0;1] ou [-1;1];

real: valor de entrada;

min: menor valor observado da variável a normalizar;

max: maior valor observado da variável a normalizar.

4.2.1.3 Correlação linear

Após a análise de dados perdidos e normalização dos dados, foi realizada uma análise de correlação linear, que mediu a intensidade da relação entre ou dentre variáveis. Esta análise foi realizada no programa *Statistical Package for the Social Sciences* (SPSS) versão 11.5.0, através do cálculo do coeficiente de Pearson (r) entre o Prem e todas as variáveis disponíveis. O coeficiente da correlação linear igual a +1 significa uma correlação linear perfeitamente positiva; igual a -1, a correlação linear perfeitamente negativa; e coeficientes iguais a zero significam que não há correlação linear entre as variáveis. Neste trabalho, a significância estatística considerada foi de 0,01 (α), que estabelece os limites permitidos para erro, com significância de correlação de 99% (Hair *et al.* 2005).

4.2.1.4 Divisão do conjunto de dados

O conjunto dos dados para a etapa de treinamento foi selecionado conforme descrito por LenCun (1993) apud Haykin (2001), de forma que o seu conteúdo de informação fosse o maior possível para a tarefa considerada. Os conjuntos de dados das variáveis de entrada da etapa de treinamento englobaram os maiores e menores valores, além de outras informações selecionadas aleatoriamente. Assim, na etapa de validação, quando a variável de saída (y) foi estimada em função das variáveis de entrada (x), o valor foi interpolado dentro dos intervalos relevantes de x , ao contrário, não se pode extrapolar além dos intervalos relevantes de x (Levine *et al.* 1998).

A partição dos dados foi de 70% para o conjunto de treinamento e 30% para o conjunto de validação (Demuth *et al.* 2008), sendo que as informações do conjunto de validação foram diferentes daquelas inseridas no conjunto de treinamento.

4.2.2 FUNÇÃO DE PEDOTRANSFERÊNCIA BASEADA EM REDES NEURAIIS ARTIFICIAIS

A implementação da FPT baseada em rede neural artificial para estimar o Prem envolveu a definição de diversos parâmetros, tais como: variáveis de entrada, topologia de rede, algoritmo de aprendizagem e momento de encerramento do treinamento. O desempenho da rede em prever o Prem foi avaliado simultaneamente nas etapas de treinamento e validação.

4.2.2.1 Topologia

A topologia da rede utilizada neste estudo pertence à classe das redes alimentadas adiante com múltiplas camadas ou também denominadas de *perceptron* multicamadas. Na camada de entrada, a quantidade de neurônios foi definida por meio de experimentos sucessivos, nos quais as informações de entrada da rede consistiram das amostras de solo utilizadas. A quantidade de camadas intermediárias e de neurônios em cada camada também foi definida por meio de experimentos. Refinamentos sucessivos foram realizados para obter a estrutura final da rede mais adequada, ou seja, aquela que apresentasse um bom desempenho na etapa de treinamento e uma boa capacidade de generalização, avaliada por meio do desempenho da rede na etapa de validação. A camada de saída foi formada por apenas um neurônio, tendo como informação de saída o fósforo remanescente das amostras de solo.

Os pesos dos neurônios e o *bias* foram gerados automaticamente pelo programa, para cada rede neural treinada. Foram realizados experimentos com as funções de ativação linear (PURELIN), sigmoidal tangente hiperbólica (TANSIG) e a sigmoidal logística (LOGSIG).

4.2.2.2 Processo de aprendizagem

Neste trabalho foi utilizado o aprendizado supervisionado, procedimento no qual as entradas e saídas são fornecidas com o objetivo de ajustar os parâmetros da rede (Braga *et al.* 2007). A diferença entre a saída calculada pela rede e a saída desejada é o erro, e a partir dele, a rede ajustou os pesos das conexões de forma a minimizá-lo (Braga *et al.* 2007). Os algoritmos de aprendizagem utilizados são variações do algoritmo *backpropagation*, como o Levenberg-Marquardt (TRAINLM), *resilient backpropagation* (TRAINRP) e gradiente conjugado escalonado (TRAINSCG), que apresentam um tempo de convergência da aprendizagem menor que outros algoritmos.

4.2.2.3 Etapa de treinamento

Na etapa de treinamento, foram utilizadas 62 amostras de solo, que representam 70% do conjunto total de dados, selecionadas de acordo com os critérios descritos no item 4.2.1.4. Durante o treinamento, para encerrar o ajuste dos pesos e *bias*, foram utilizados três critérios de encerramento: (i) parada antecipada, (ii) número de ciclos e/ou (iii) o objetivo. No encerramento por parada antecipada, o treinamento é interrompido várias vezes para testar o

conjunto de validação, sendo que nesse momento os parâmetros livres da rede (pesos e *bias*) são fixos e a rede opera no seu modo direto (para frente) (Haykin 2001). Os dois últimos critérios são determinados pelo usuário, sendo que o treinamento cessa quando a rede alcança o objetivo ou quando o número de ciclos determinado é alcançado. No critério de parada antecipada, o treinamento cessa quando o erro da validação começa a aumentar. A partir desse momento, na etapa de treinamento, a rede começa a memorizar os dados de entrada, processo denominado de *overfitting*.

O critério de encerramento para os treinamentos realizados partir da RNA207 foi o de parada antecipada, utilizando alterações nos parâmetros da rede de acordo com o especificado por Demuth *et al.* (2008). Os parâmetros de treinamento variaram de acordo com o algoritmo de aprendizagem utilizado e com exceção do objetivo e do número de ciclos, os quais foram determinados pelo usuário, os valores utilizados foram sugeridos por Demuth *et al.* (2008).

4.2.2.4 Etapa de validação

Na etapa de validação, foram utilizadas 27 amostras de solo, diferentes das utilizadas na etapa de treinamento, que representaram 30% do conjunto total de dados. A validação foi realizada com o objetivo de verificar a capacidade de generalização da rede.

4.2.2.4 Árvore de testes

Durante as etapas de treinamento e validação foi organizada uma árvore de testes, que consistiu em uma tabela contendo todas as informações e resultados de desempenhos de cada experimento realizado. A árvore de testes auxiliou no desenvolvimento dos experimentos e na definição da topologia e das variáveis de entrada. As informações inseridas na árvore de testes foram: número do experimento, variáveis de entrada, número de camadas intermediárias e de neurônio em cada camada, intervalo de normalização, função de ativação, algoritmo de treinamento, número de ciclos, objetivo e desempenho nas etapas de treinamento e de validação.

Foram realizados 1.086 treinamentos e validações para encontrar a melhor combinação de variáveis de entrada e topologia de rede para estimar o valor de fósforo remanescente das amostras de utilizadas. No total, foram utilizadas 280 combinações de variáveis de entrada, cuja seleção dos atributos foi realizada utilizando estudos já existentes sobre a sorção de P e como esta é influenciada pelas características do solo. Além disso, a

partir dos testes realizados pôde-se perceber quais atributos de entrada resultavam em redes como boa capacidade de estimar o Prem

4.2.2.5 Desnormalização dos resultados

Os valores de saída da rede (fósforo remanescente) na etapa de validação, que estavam normalizados no intervalo [0;1] e [-1;1] foram desnormalizados por meio da Equação (12), ou seja, foram convertidos para os valores reais.

$$y_{real} = y_{norm} \times (y_{max} - y_{min}) + y_{min} \quad (12)$$

em que:

y_{real} : valor de saída observado;

y_{norm} : valor de saída normalizado no intervalo de [0;1];

y_{max} : maior valor real observado da variável de saída;

y_{min} : menor valor real observado da variável de saída.

4.2.2.6 Desempenho da rede

O cálculo do desempenho na etapa de treinamento foi realizado automaticamente, medido por meio do erro quadrado médio (EQM). Na etapa de validação o desempenho foi calculado a partir dos valores de Prem desnormalizados, por meio do coeficiente de determinação (R^2), soma do quadrado dos resíduos/erros (SQR) e EQM (Equação 13 e 14).

$$SQR = \sum_{i=1}^n (e)^2 \quad (13)$$

$$EQM = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (e)^2 \quad (14)$$

em que:

n : número de amostras;

e : diferença entre o valor calculado e o conhecido;

i : amostra.

4.2.3 FUNÇÃO DE PEDOTRANSFERÊNCIA BASEADA EM ANÁLISE DE REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA

A análise de regressão linear múltipla foi realizada com o programa *Statistical Analysis System* – SAS 9.1 utilizando-se com o objetivo de estabelecer uma relação funcional entre uma variável dependente (Prem) e “n” variáveis independentes representadas por outros atributos do solo. O modelo estatístico utilizado para a análise de regressão linear múltipla é dado pela Equação (15) (Ribeiro Junior 1966).

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \dots + \beta_p X_{pi} + e_i \quad (15)$$

em que:

Y_i : valor observado da variável Y no nível i das variáveis independentes;

β_0 : constante de regressão;

β_1 : coeficiente de regressão para a variável X_1 ;

β_2 : coeficiente de regressão para a variável X_2 ;

β_p : coeficiente de regressão para a variável X_p ;

X_{1i} : valor do nível i da variável X_1 ($i = 1, 2, \dots, n$);

X_{2i} : valor do nível i da variável X_2 ;

X_{pi} : valor do nível i da variável X_p ;

e_i : erro ou desvio padrão associado à distância entre o valor observado Y_i e o valor estimado \hat{Y}_i com base na equação de regressão.

As variáveis independentes utilizadas na análise de regressão foram aquelas que apresentaram um bom desempenho na etapa de validação, quando utilizadas como variáveis de entrada nos experimentos realizados com redes neurais. A análise de regressão linear múltipla foi realizada com o principal objetivo de avaliar os resultados obtidos por meio das redes neurais artificiais.

A equação que relaciona o Prem como função de alguns atributos do solo foi gerada a partir do mesmo conjunto de dados utilizado na etapa de treinamento das redes neurais.

Posteriormente, a equação foi testada a partir do mesmo conjunto de dados empregado na etapa de validação das redes. O desempenho da análise de regressão linear múltipla foi avaliado comparativamente ao da RNA confrontando-se os valores de Prem estimados por ambos os procedimentos com os respectivos valores conhecidos do conjunto de validação. Essa comparação consistiu no ajuste de uma equação polinomial de primeiro grau utilizando esses pares de valores, e nas avaliações dos valores dos coeficientes lineares e angulares das retas, dos valores dos coeficientes de determinação e dos valores da soma de quadrados da diferença entre os valores de Prem medidos e seus respectivos valores estimados pela FPT.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados e discussões apresentados neste trabalho são referentes às características das amostras de solo utilizadas, desenvolvimento da função de pedotransferência para estimar o fósforo remanescente por meio de redes neurais artificiais e análise de regressão linear múltipla.

5.1 Caracterização dos solos

O conjunto de amostras compreendeu diversas classes de solo, incluindo os Neossolos, Nitossolos, Luvisolos, Cambissolos, Gleissolos, Plintossolos, Chernossolos, Planossolos e os Latossolos e Argissolos que representam cerca de 60% do conjunto total. As amostras de solo utilizadas neste estudo foram coletadas dentro dos limites do Estado de São Paulo, porém, apenas parte das coordenadas estavam disponíveis no conjunto de dados (Figura 08).

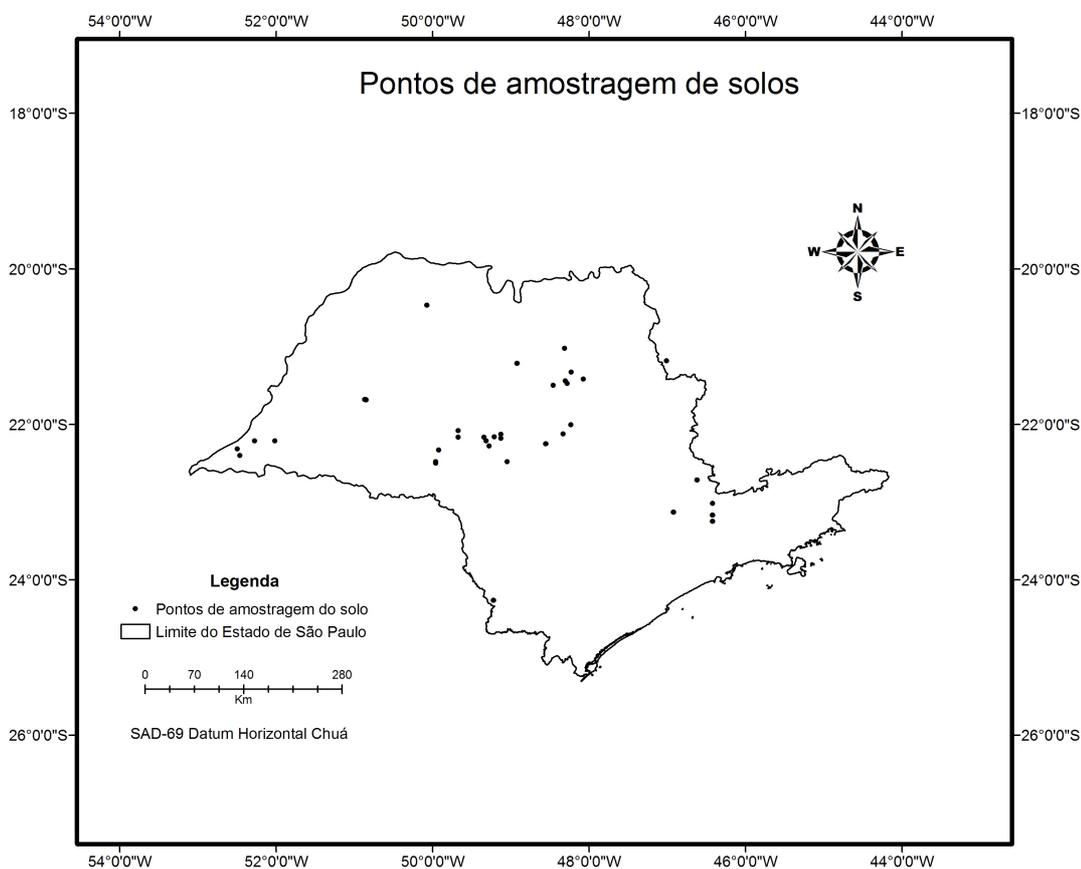


Figura 08 – Localização de alguns pontos de amostragem de solo no Estado de São Paulo.

A classificação dos solos, localização dos pontos, profundidade da amostragem e material de origem (ANEXO A) foram disponibilizadas pelo IAC juntamente com as informações físicas, químicas, mineralógicas e eletroquímicas (ANEXO B). Porém, neste estudo, não foram considerados os aspectos como material que originou o solo, nem mesmo as condições do relevo e o uso atual do solo.

A estatística descritiva do conjunto de dados está apresentada na Tabela 02 e contém os valores mínimos, máximos, média, desvio padrão e número de informações do conjunto de dados para cada atributo do solo. As amostras utilizadas neste estudo possuíam na maioria textura argilosa a muito argilosa (conteúdo de argila > 350 g kg⁻¹) e pH variando de fortemente (4,3 < pH H₂O < 5,3) a moderadamente ácidos (5,4 < pH H₂O < 6,5) (EMBRAPA 2006). Os valores de pH NaF variaram de 8,32 a 10,50, sendo que a média para o conjunto foi de 9,66.

Tabela 02 – Estatística descritiva do conjunto total de dados.

Atributos ⁽¹⁾	Número de amostras ⁽²⁾	Valor Mínimo	Valor Máximo	Média	Desvio Padrão
Prem (mg L ⁻¹)	117	0,00	48,00	16,08	13,85
pH NaF	117	8,32	10,50	9,66	0,49
Areia Grossa (g kg ⁻¹)	117	0,00	580,00	189,36	129,02
Areia Fina (g kg ⁻¹)	117	30,00	670,00	275,85	159,71
Areia Total (g kg ⁻¹)	117	40,00	940,00	465,21	225,47
Silte (g kg ⁻¹)	117	0,00	370,00	117,26	75,97
Argila (g kg ⁻¹)	117	60,00	805,00	419,11	183,74
C (g kg ⁻¹)	116	0,00	60,00	6,53	7,46
pH H ₂ O	116	04,00	7,00	5,33	0,62
pH KCl	117	0,00	6,90	4,66	0,77
ΔpH	117	-1,70	0,80	-0,63	0,46
Ca ²⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	117	0,00	22,90	1,27	2,50
Mg ²⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	117	0,00	9,00	0,43	0,95
K ⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	117	0,00	27,00	0,31	2,49
Na ⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	117	0,00	0,40	0,01	0,04
SB (cmol _c kg ⁻¹)	117	0,00	32,26	2,02	4,30
Al ³⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	117	0,00	5,00	0,68	0,91
H ⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	117	0,00	10,40	2,57	1,95
H+Al (cmol _c kg ⁻¹)	117	0,00	15,40	3,25	2,43
T (cmol _c kg ⁻¹)	117	0,00	34,16	5,28	4,60
V (%)	117	0,00	100,00	30,53	28,15
m (%)	116	0,00	98,48	38,49	36,89
SiO ₂ (g kg ⁻¹)	92	16,00	358,40	138,83	70,17
Al ₂ O ₃ (g kg ⁻¹)	92	18,00	328,40	154,26	70,37
Fe ₂ O ₃ (g kg ⁻¹)	92	3,00	328,00	92,98	79,47
Ki (mol mol ⁻¹)	92	0,21	4,98	1,62	0,67
Kr (mol mol ⁻¹)	92	0,10	2,30	1,20	0,46

⁽¹⁾ Prem: fósforo remanescente; pH NaF: pH medido em solução de fluoreto de sódio; C: carbono orgânico; pH H₂O: pH medido em água; pH KCl: pH medido em solução de Cloreto de Potássio; ΔpH: diferença entre os valores de pH KCl e pH H₂O; Ca²⁺: cálcio; Mg²⁺: magnésio; K⁺: potássio; Na⁺: sódio; SB: soma de bases; Al³⁺: alumínio trocável; H⁺: hidrogênio extraível; H+Al: acidez total; T: capacidade de troca catiônica potencial; V: saturação por bases; m: saturação por alumínio; SiO₂: sílica; Al₂O₃: óxidos de alumínio; Fe₂O₃: óxidos de ferro; Ki e Kr: índices de intemperismo. ⁽²⁾ Número de amostras válidas: 89.

A maioria das amostras apresentou carga elétrica líquida do solo negativa, ou seja, $\Delta\text{pH} < 0$ (SOUSA *et al.* 2007). Os solos que apresentaram saldo de cargas positivo, valores de pH medidos em solução KCl mais elevados do que os medidos em água, apresentam-se em estágio muito avançado de intemperização (EMBRAPA 2006).

A fração argila, à exceção de poucas amostras, apresentou atividade baixa ($T < 27 \text{ cmol}_c \text{ kg}^{-1}$); baixa saturação por bases ($V < 50\%$); e soma de base (SB) média igual a $2,02 \text{ cmol}_c \text{ kg}^{-1}$ (EMBRAPA 2006). Os teores de alumínio trocável (Al^{3+}) variaram de 0,0 a $5,0 \text{ cmol}_c \text{ kg}^{-1}$, a saturação por alumínio (m) de 0,0 a 98,48 % e a acidez potencial (H+Al) de 0,0 a $15,40 \text{ cmol}_c \text{ kg}^{-1}$. Os teores médios de silício, ferro e alumínio extraíveis pelo ataque sulfúrico e expressos sob a forma de óxidos (SiO_2 , Fe_2O_3 a Al_2O_3) foram respectivamente iguais a 138,83, 154,26 e $92,98 \text{ g kg}^{-1}$.

O índice de intemperismo Ki variou de 0,21 a 4,98 demonstrando uma ampla variação nos estádios de intemperismo. Embora 73% das amostras possam ser consideradas como provenientes de solos altamente intemperizados ($\text{Ki} < 2,0$), apenas 17% delas podem ser consideradas oxídicas ($\text{Kr} < 0,75$) (EMBRAPA, 2006).

Os teores de Prem nas amostras de solo variaram de 0 a $48,0 \text{ mg L}^{-1}$. Os valores são semelhantes aos encontrados por Valladares *et al.* (2003) em camadas subsuperficiais de solo com argila de baixa atividade proveniente de diferentes regiões do Brasil

Os solos mais arenosos apresentaram os maiores valores de fósforo remanescente, como é o caso da amostra 30 que contém 875 g kg^{-1} de areia total e 48 mg L^{-1} de Prem. Ao contrário, solos mais argilosos apresentaram as menores concentrações de fósforo remanescente, como por exemplo, a amostra 20 que contém 805 g kg^{-1} de argila e $4,6 \text{ mg L}^{-1}$ de Prem. De acordo com as informações disponibilizadas, o solo da amostra 30 está sobreposto a sedimentos arenosos e o solo da amostra 20, de sedimentos aluvionais argilosos do Quaternário. A presença de maiores concentrações de Prem em solos arenosos e de menores concentrações em solos argilosos está de acordo com o descrito por Valladares *et al.* (2003) e Donagemma *et al.* (2008).

5.2 Desenvolvimento da função de pedotransferência

São apresentados neste item os resultados obtidos nas etapas de pré-processamento dos dados, árvore de testes e desenvolvimento da função de pedotransferência para estimar o Prem.

5.2.1 PRÉ-PROCESSAMENTO DOS DADOS

A retirada dos dados perdidos resultou num conjunto de informações formado por 27 variáveis (atributos do solo) e 89 amostras (Tabela 03). Um total de 28 amostras foi excluído do conjunto por falta de resultados em um ou mais atributos do solo. A retirada dessas amostras não apresentou alterações significativas em relação à estatística descritiva apresentada na Tabela 02, ou seja, as características dos solos descritas anteriormente permaneceram praticamente as mesmas.

Tabela 03 – Estatística descritiva do conjunto de dados após análise de dados perdidos.

Atributos ⁽¹⁾	Número de amostras ⁽¹⁾	Valor Mínimo	Valor Máximo	Média	Desvio Padrão
Prem (mg L ⁻¹)	89	0,00	47,30	14,77	13,56
pH NaF	89	8,32	10,50	9,69	0,49
Areia Grossa (g kg ⁻¹)	89	0,00	500,00	180,08	128,17
Areia Fina (g kg ⁻¹)	89	30,00	670,00	259,81	161,02
Areia Total (g kg ⁻¹)	89	40,00	940,00	439,89	213,80
Silte (g kg ⁻¹)	89	0,00	370,00	124,61	78,53
Argila (g kg ⁻¹)	89	60,00	805,00	437,31	173,03
C (g kg ⁻¹)	89	0,20	60,00	7,04	8,16
pH H ₂ O	89	4,10	7,00	5,31	0,63
pH KCl	89	3,70	6,90	4,71	0,65
ΔpH	89	-1,70	0,80	-0,60	0,43
Ca ²⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	89	0,00	22,90	1,29	2,72
Mg ²⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	89	0,00	9,00	0,41	1,00
K ⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	89	0,00	27,00	0,38	2,86
Na ⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	89	0,00	0,16	0,01	0,02
SB (cmol _c kg ⁻¹)	89	0,01	32,26	2,08	4,76
Al ³⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	89	0,00	5,00	0,67	0,96
H ⁺ (cmol _c kg ⁻¹)	89	0,00	10,40	2,76	2,08
H+Al (cmol _c kg ⁻¹)	89	0,00	15,40	3,43	2,63
T (cmol _c kg ⁻¹)	89	0,70	34,16	5,51	5,05
V (%)	89	0,34	100,00	29,37	29,31
m (%)	89	0,00	98,48	39,77	38,02
SiO ₂ (g kg ⁻¹)	89	16,00	358,40	138,04	70,92
Al ₂ O ₃ (g kg ⁻¹)	89	18,00	328,40	152,47	70,71
Fe ₂ O ₃ (g kg ⁻¹)	89	3,00	328,00	90,42	78,32
Ki (mol mol ⁻¹)	89	0,21	4,98	1,63	0,67
Kr (mol mol ⁻¹)	89	0,10	2,30	1,21	0,47

⁽¹⁾ Prem: fósforo remanescente; pH NaF: pH medido em solução de fluoreto de sódio; C: carbono orgânico; pH H₂O: pH medido em água; pH KCl: pH medido em solução de Cloreto de Potássio; ΔpH: diferença entre os valores de pH KCl e pH H₂O; Ca²⁺: cálcio; Mg²⁺: magnésio; K⁺: potássio; Na⁺: sódio; SB: soma de bases; Al³⁺: alumínio trocável; H⁺: hidrogênio extraível; H+Al: acidez total; T: capacidade de troca catiônica potencial; V: saturação por bases; m: saturação por alumínio; SiO₂: sílica; Al₂O₃: óxidos de alumínio; Fe₂O₃: óxidos de ferro; Ki e Kr: índices de intemperismo.

As características dos solos que constituíram o conjunto final de dados foram: fósforo remanescente, teores de areia fina e grossa, teor total de areia, teor de argila, teor de silte, pH NaF, pH H₂O, pH KCl, ΔpH, teores trocáveis de cálcio, magnésio, potássio, sódio e alumínio,

soma de bases trocáveis, capacidade de troca de cátions potencial, saturação por bases e por alumínio, teor de carbono oxidável, teor de hidrogênio extraível, índices de intemperismo, teores de óxidos de alumínio, de ferro e sílica extraíveis por ataque sulfúrico, e acidez potencial.

Após a avaliação dos dados perdidos e a normalização dos mesmos nos intervalos entre [0;1] e [-1;1], as correlações lineares entre as variáveis e o Prem foram analisadas. Os coeficientes das correlações lineares para os conjuntos de dados estão apresentados na Tabela 04. As variáveis que apresentaram correlação com o Prem foram: teores de areia fina, de areia total e de argila, índice Kr, pH NaF, Δ pH e teores de SiO₂, Al₂O₃ e Fe₂O₃.

Tabela 04 – Coeficientes de correlação linear (r) entre o Prem e os demais atributos do solos.

Variável	Prem
Prem	1,000
Areia Grossa	0,210*
Areia Fina	0,679**
Areia Total	0,637**
Silte	-0,251*
Argila	-0,667**
pH NaF	-0,919**
pH H ₂ O	-0,072
pH KCl	-0,267*
Δ pH	-0,294**
Ca ²⁺	-0,012
Mg ²⁺	-0,019
K ⁺	0,029
Na ⁺	0,198
SB	0,007
Al ³⁺	0,020
H ⁺	-0,257*
T	-0,095
V	0,187
M	0,056
C	0,023
SiO ₂	-0,305**
Al ₂ O ₃	-0,527**
Fe ₂ O ₃	-0,573**
Ki	0,200
Kr	0,406**
H+Al	-0,196

*Significância da correlação com 90% de confiança ($\alpha=0,05$), teste bilateral.

** Significância da correlação com 99% de confiança ($\alpha=0,01$), teste bilateral.

A correlação mais expressiva foi observada entre o Prem e o pH NaF. Tal correlação também foi encontrada por Alves (2002), indicando a importância dessa determinação na avaliação da capacidade de sorção de fosfatos. A segunda correlação mais importante foi entre o Prem e a areia fina, confirmando os estudos desenvolvidos por Valladares *et al.* (2003)

e Donagemma *et al.* (2008). O índice de correlação entre o Prem e argila foi semelhante ao encontrado entre o Prem e a areia fina.

5.2.2 ÁRVORE DE TESTES

Na busca por definir a topologia mais adequada para desenvolver um FPT para estimar o Prem, os experimentos foram realizados dentro das limitações de tempo disponíveis para a execução dos treinamentos e sucessivos refinamentos necessários. Em nenhum momento foi levado em consideração o tempo de convergência da rede ao erro mínimo definido. A árvore de testes desenvolvida durante a realização dos treinamentos e validações apresenta todas as combinações e topologias testadas (ANEXO C).

Os melhores resultados foram obtidos com os valores normalizados entre [0;1] e consequentemente com a função de ativação sigmoidal logística (LOGSIG) que assume valores entre 0 e 1. A função de ativação sigmoidal é a mais utilizada na ciência do solo (Somaratne *et al.* 2005, Wang *et al.* 2006, Agyare *et al.* 2007, Jana *et al.* 2007), sendo geralmente associada a algoritmos de treinamento do tipo *backpropagation* (Demuth *et al.* 2008). O uso da função de ativação sigmoidal nas camadas intermediárias e da função de ativação linear na camada de saída não apresentou bons resultados, quando comparada ao uso da função de ativação sigmoidal em todas as camadas.

Nos testes realizados, o melhor desempenho na etapa de treinamento nem sempre correspondeu aos melhores resultados na etapa de validação. Este fato geralmente acontece quando a rede memoriza os dados de treinamento e perde a capacidade de generalização, fenômeno denominado de *overfitting*. Este excesso de ajuste ou excesso de treinamento pode ocorrer em função da topologia da rede não ser adequada à complexidade física do problema ou devido à representatividade do conjunto de treinamento.

Os melhores desempenhos foram obtidos utilizando o algoritmo de aprendizagem *resilient backpropagation* (TRAINRP) e Levenberg-Marquardt (TRAINLM), que são variações do algoritmo *backpropagation*. O algoritmo gradiente conjugado escalonado (TRAINSCG), também variação do algoritmo *backpropagation*, apresentou resultados inferiores aqueles alcançados pelo *resilient backpropagation* (TRAINRP) e pelo Levenberg-Marquardt (TRAINLM).

Com relação ao número de ciclos, os experimentos foram realizados utilizando no máximo 1.000 ciclos, no entanto, com menos de 50 as redes apresentaram bons resultados na etapa de validação.

Os atributos do solo correlacionados com o Prem foram utilizados como variáveis de entrada da RNA109: areia fina, areia total, Kr, argila, pH NaF, Δ pH, SiO₂, Al₂O₃ e Fe₂O₃. A partir dessas variáveis de entrada, cerca de 80 experimentos foram realizados modificando a arquitetura, função de ativação, algoritmo de treinamento e número de ciclos. Independentemente da arquitetura e dos parâmetros da rede, a retirada de algumas das variáveis da camada de entrada apresentou melhoras na etapa de validação. A RNA113 composta por todas estas variáveis na camada de entrada apresentou R^2 0,7515 na etapa de validação. A retirada das variáveis Kr, SiO₂, Al₂O₃ e Fe₂O₃ da camada de entrada da rede neural (RNA157), resultou no melhor resultado obtido nestes 80 experimentos, R^2 0,8296.

Utilizando apenas o pH NaF como variável de entrada na RNA318, o desempenho obtido na etapa de validação foi de 0,8014 (R^2). Este resultado corrobora com outros autores no sentido de que o pH NaF é uma medida indireta da capacidade de sorção de fósforo pelo solo (Singh & Gilkes 1991) e consequentemente do Prem. O pH NaF poderia substituir o Prem, porém, o coeficiente de variação (*CV*) do pH NaF, considerando-se todas as amostras utilizadas no desenvolvimento da rede, foi 5,01%, enquanto o *CV* do Prem foi 91,80%, indicando que o Prem possui capacidade discriminatória de solos muito maior, ou seja, o Prem é capaz de discriminar dois solos com pequenas diferenças quanto às capacidades de sorção de ânions, algo não possível com o pH NaF devido a sua escala logarítmica.

Foram realizadas associações entre o pH NaF e os demais atributos do solo para compor a camada de entrada da rede, porém a variável que acrescida ao pH NaF melhorou o desempenho da rede na etapa de validação foi o alumínio trocável (Al³⁺) (RNA 673). O poder de predição da RNA formada pelo pH NaF e Al³⁺ como variáveis de entrada apresentou-se 8,7% maior do que a rede cujo pH NaF foi a única variável de entrada. Outras variáveis associadas ao pH NaF também apresentaram desempenho melhor na etapa de validação do que a RNA318, como por exemplo: silte (RNA344, R^2 0,8549), H+Al (RNA526, R^2 0,8468), Kr (RNA317, R^2 0,8467), H⁺ (RNA787, R^2 0,8425), C (RNA807, R^2 0,8374), T (RNA795, R^2 0,8367), Δ pH (RNA761, R^2 0,8342), SiO₂ (RNA816, R^2 0,834), Na⁺ (RNA776, R^2 0,8245), Ca²⁺ (RNA769, R^2 0,8228), m (RNA798, R^2 0,8176) e V (RNA358, R^2 0,8105).

Ao contrário do que se supunha, o uso de todos os atributos do solo disponíveis como variáveis de entrada não resultou em um bom aprendizado da rede e tampouco lhe conferiu boa capacidade de generalização. A RNA216 e a RNA217 foram desenvolvidas com 26 variáveis de entrada e o desempenho na etapa de validação foi próximo de 0,80 (R^2), praticamente o mesmo resultado encontrado quando utilizado apenas o pH NaF como variável de entrada. As topologias das duas redes testadas foram simples, com apenas uma camada

intermediária de neurônios. De qualquer forma, talvez a topologia das redes não estivesse adequada à complexidade do problema abordado ou a quantidade de variáveis foi grande demais dificultando o aprendizado da rede.

A partir da RNA835 foram realizados diversos experimentos, utilizando como variáveis de entrada algumas características do solo estudadas por Falcão & Silva (2004) para avaliar as características de sorção de fósforo em Latossolos e Argissolos. Além do pH NaF que apresentou bom desempenho nos experimentos anteriores, as demais variáveis utilizadas como atributo de entrada foram: o alumínio trocável (Al^{3+}) que se correlacionou positivamente com a CMSP no estudo de Falcão & Silva (2004); a soma de bases (SB); o conteúdo de sílica (SiO_2); o pH medido em H_2O (pH H_2O); o carbono orgânico (C) e a acidez potencial (H+Al) que apresentaram baixa correlação com a CMSP no estudo de Falcão & Silva (2004). As variáveis foram sendo retiradas uma a uma, até alcançar um bom desempenho na etapa de treinamento e principalmente na a etapa de validação. A melhor combinação de variáveis de entrada foi pH NaF, SB e Al^{3+} (RNA1063), que alcançou um desempenho na etapa de validação de 0,9171 (R^2). De acordo com a análise de correlação linear realizada anteriormente (Tabela 04), o pH NaF foi a única das variáveis que apresentou correlação significativa com o Prem; tanto a SB quanto o Al^{3+} não se correlacionaram com o Prem.

Do total de experimentos realizados, apenas cinco redes neurais artificiais, apresentaram R^2 superior a 0,9 na etapa de validação, inclusive a RNA1063 (Tabela 05). Os demais experimentos realizados apresentaram resultados inferiores na etapa de validação.

Tabela 05 – Experimentos realizados por meio de redes neurais artificiais, para estimar o fósforo remanescente (Prem), que obtiveram desempenho na etapa de validação superior a 0,9, medido pelo coeficiente de determinação (R^2).

Experimento	Variáveis de entrada	Desempenho do treinamento (EQM)	Desempenho da validação (R^2)
RNA1063	pH NaF, Al^{3+} , SB	0,007015	0,9171
RNA1060	pH NaF, Al^{3+} , SB	0,005062	0,9155
RNA1014	pH NaF, Al^{3+} , ΔpH	0,007068	0,9094
RNA965	pH NaF, Al^{3+} , T	0,008431	0,9050
RNA984	pH NaF, Al^{3+} , T	0,005602	0,9042

As redes que apresentaram R^2 superiores a 0,9 tiveram seus valores de entrada normalizados no intervalo entre 0 e 1; função de ativação LOGSIG, com exceção da RNA1060 que utilizou TANSIG; algoritmo de treinamento TRAINLM, com exceção da RNA1063 que utilizou TRAINRP; e função de aprendizagem LEARNGD (Tabela 06). O

número de ciclos variou entre 13 e 28 sendo que a rede que apresentou o melhor resultado na validação (RNA1063) utilizou 21 ciclos na etapa de treinamento.

Tabela 06 – Topologia e características das redes neurais artificiais que apresentaram desempenho superior a 0,9, medido por meio do coeficiente de determinação (R^2).

Experimento	Variáveis de entrada	Topologia	Função de ativação ⁽¹⁾	Algoritmo de aprendizagem ⁽²⁾	Função de aprendizagem ⁽³⁾	Ciclos
RNA1063	pH NaF, SB, Al ³⁺	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINRP	LEARNGD	21
RNA1060	pH NaF, SB, Al ³⁺	[3 14 1]	TANSIG	TRAINLM	LEARNGD	23
RNA1014	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	LEARNGD	20
RNA965	pH NaF, Al ³⁺ , T	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	LEARNGD	13
RNA984	pH NaF, Al ³⁺ , T	[3 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	LEARNGD	17

⁽¹⁾ LOGSIG: função de ativação sigmoidal logística; TANSIG: função de ativação tangente hiperbólica. ⁽²⁾ TRAINRP: Algoritmo de aprendizagem *resilient backpropagation*; TRAINLM: Algoritmo de aprendizagem Levenberg-Marquart. ⁽³⁾ LEARNGD: função de aprendizagem gradiente descendente.

A topologia das redes foi bastante semelhante entre os experimentos apresentados na Tabela 06: todas contaram com três neurônios na camada de entrada (variáveis de entrada); um neurônio na camada de saída (Prem); e de 9 a 16 neurônios em uma única camada intermediária, que foram responsáveis por extrair as características mais significativas do conjunto de dados.

As redes que apresentaram os melhores desempenhos na etapa de validação apresentaram na camada de entrada as variáveis pH NaF e Al³⁺, acrescidas em cada caso de variáveis como SB, ΔpH e T. A rede neural que apresentou o melhor resultado foi a RNA1063, cujas variáveis de entrada são pH NaF, SB e Al³⁺, sendo os dois últimos atributos determinados em análises químicas de rotina. A topologia da RNA1063 está apresentada na Figura 09.

Segundo Singh & Gilkes (1991), o valor de pH medido em solução de fluoreto de sódio apresenta correlação direta com a capacidade de sorção de fósforo no solo. Uma correlação semelhante, porém inversa, foi encontrada entre os valores de Prem e pH NaF no presente estudo ($r = -0,919$). A relação entre as variáveis pode ser explicada, uma vez que o pH NaF mede a quantidade de íons OH disponíveis para troca com o íon flúor (F) (Gilkes & Hughes 1994) e que a retenção de fósforo pelo solo se dá principalmente pela troca de hidroxilas da superfície dos óxidos pelo ânion fosfato. Valores elevados de pH NaF significam grandes quantidades de hidroxilas disponíveis para troca, conseqüentemente uma maior sorção de P pelo solo e uma menor concentração de fósforo remanescente na solução do solo.

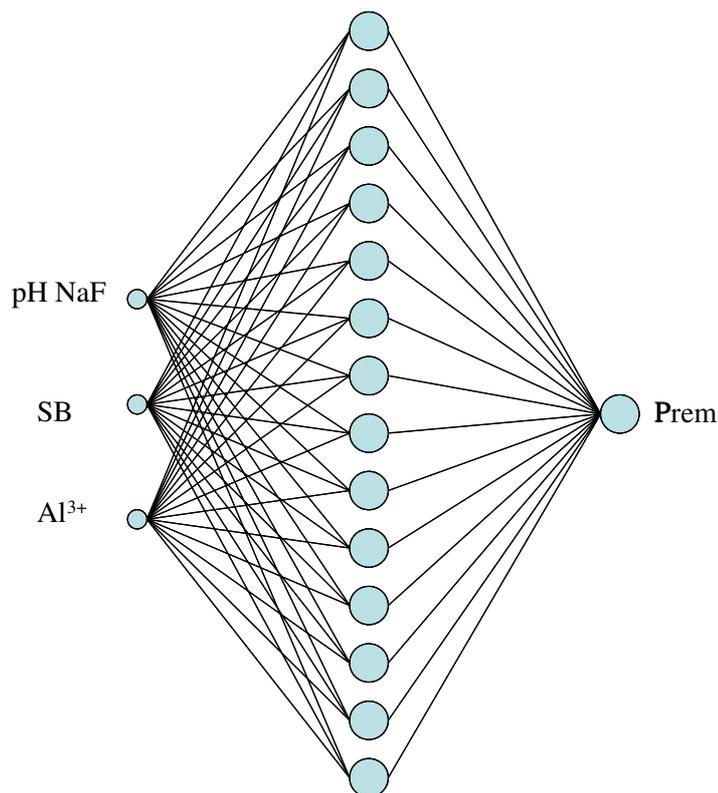


Figura 09 – Topologia da rede neural artificial 1063 [3 14 1]: 3 neurônios na camada de entrada, 14 na camada intermediária e 1 na camada de saída.

Considerando as amostras de solo utilizadas neste estudo, os atributos SB e Al^{3+} apresentaram correlação nula com o Prem. Contudo, segundo Falcão & Silva (2004), a CMSP pode apresentar correlação positiva com o Al^{3+} , indicando que na medida em que a concentração de alumínio trocável no solo aumenta o Prem diminui. Tal observação advém do fato que solos ricos em Al^{3+} apresentam baixo valor de pH, condição essa mais favorável à sorção de P devido ao desenvolvimento de cargas positivas nas superfícies de minerais como os óxidos de ferro e de alumínio ($-\text{OH} + \text{H}^+ \rightarrow -\text{OH}_2^+$). Embora a sorção de P não seja puramente eletrostática, o desenvolvimento de cargas positivas contribui para o aumento da mesma.

Com relação à soma de bases, solos que apresentam maior valor de SB ($\text{K}^+ + \text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+} + \text{Na}^+$) apresentam valor de pH normalmente mais elevado, condição essa menos favorável a sorção de P (Novais & Smith, 1999), o que resultaria em uma correlação inversa entre o Prem e o referido atributo.

O desempenho da RNA1063 na etapa de treinamento, em termos do erro quadrático médio, decresceu com o aumento do número de ciclos (Figura 10). Na etapa de validação, o EQM também decresceu para um mínimo e a partir do ciclo 21 começou a subir na medida em que o treinamento continuou. De acordo com método de parada antecipada, o melhor

momento para encerrar a etapa de treinamento foi depois do ciclo 21, a partir de então, a rede começaria a aprender o ruído contido no conjunto de dados, consequentemente perderia a capacidade de generalização. O tamanho do conjunto de treinamento (62 amostras) da RNA1063 foi menor do que a quantidade de parâmetros livres da mesma (71 parâmetros), e por este motivo, o treinamento com parada antecipada auxiliou na melhora do desempenho de generalização da rede em relação ao treinamento contínuo, segundo Haykin (2001).

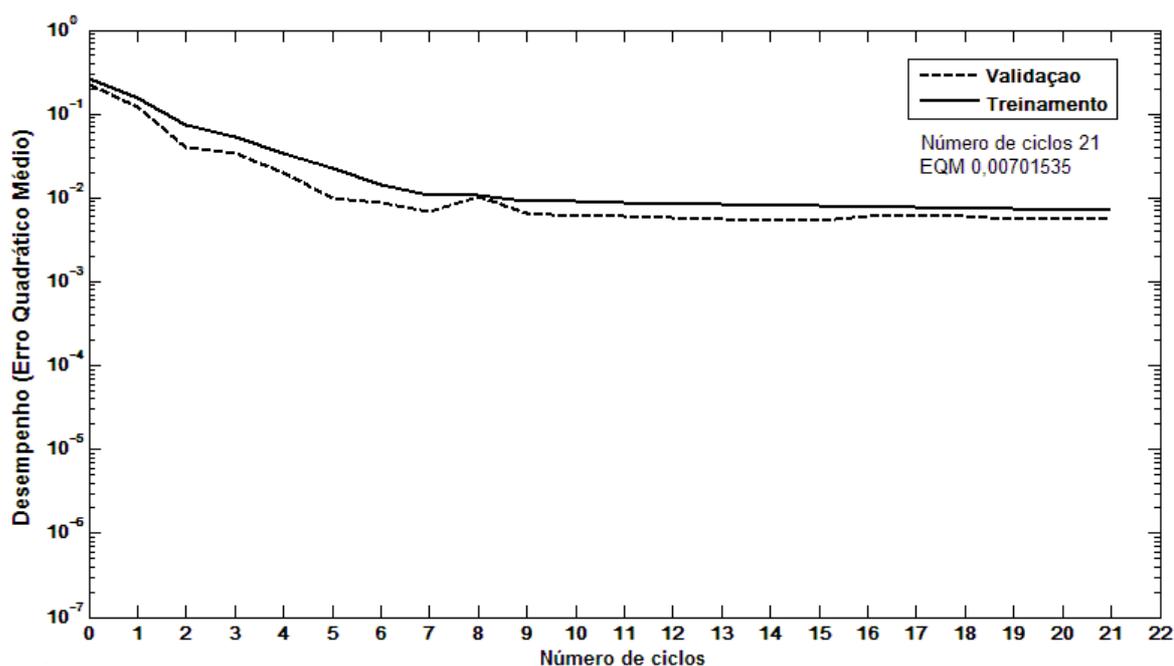


Figura 10 – Curva de desempenho das etapas de treinamento e validação da rede neural artificial 1063, medido por meio do erro quadrático médio (EQM).

Os parâmetros livres (pesos e *bias*) da RNA1063 estão apresentados nas Tabelas 07 e 08. Os pesos sinápticos armazenam o conhecimento adquirido pela rede durante a etapa de treinamento e o *bias*, um parâmetro externo ao neurônio, foi importante para evitar erros quando os dados de entrada foram nulos. Os pesos sinápticos representam a força das conexões entre os neurônios, os valores positivos significaram ligações excitatórias e os negativos inibiram a ativação do neurônio. Os pesos sinápticos e os *bias* foram gerados de forma aleatória pelo programa e foram sendo atualizados em função do erro entre o Prem determinado e o estimado.

Tabela 07 – Pesos sinápticos dos neurônios da camada intermediária e de saída da rede neural artificial 1063.

Neurônios da Camada Intermediária	Pesos Sinápticos			
	Entrada 1 (pH NaF)	Entrada 2 (Al ³⁺)	Entrada 3 (SB)	Saída (Prem)
1	-6,28500	9,55550	-4,65770	1,34790
2	-5,96830	9,08070	-7,92630	-0,70489
3	0,30684	5,14910	-11,77020	-0,62955
4	7,63360	2,32030	-10,78700	-3,04800
5	-10,07620	7,85360	-3,24230	2,00340
6	-0,07242	-9,68760	-10,58910	2,04000
7	11,97120	-5,79760	2,03680	-0,10976
8	5,14900	10,29540	9,37510	-1,46330
9	-9,84030	4,61760	-6,41320	1,98270
10	-8,15510	6,63940	7,89410	-0,73963
11	-12,56530	-2,74440	4,72700	1,21010
12	-8,64520	-10,18840	1,96290	-0,05444
13	-4,19060	-10,26430	-2,33850	-0,81704
14	-10,37360	-8,31610	-2,56090	-2,27220

Tabela 08 – Bias dos neurônios da camada intermediária e de saída, da rede neural artificial 1063.

Neurônios da Camada Intermediária	Bias	Neurônio da Camada de Saída	Bias
1	5,0230	1	-1,1156
2	9,7499		
3	-5,2788		
4	-2,7326		
5	5,0797		
6	6,8299		
7	-4,9702		
8	-9,9545		
9	3,3703		
10	-4,8816		
11	0,7715		
12	3,3435		
13	4,5378		
14	3,8604		

A capacidade de generalização, que representa a competência da rede neural em apresentar respostas adequadas para dados de entrada não compreendidos no conjunto de treinamento, foi avaliada na etapa de validação. Os valores do fósforo remanescente determinados e estimados pela rede neural artificial 1063, para os dados do conjunto de validação que representam 30% das amostras de solo do conjunto total, estão apresentados na Figura 11.

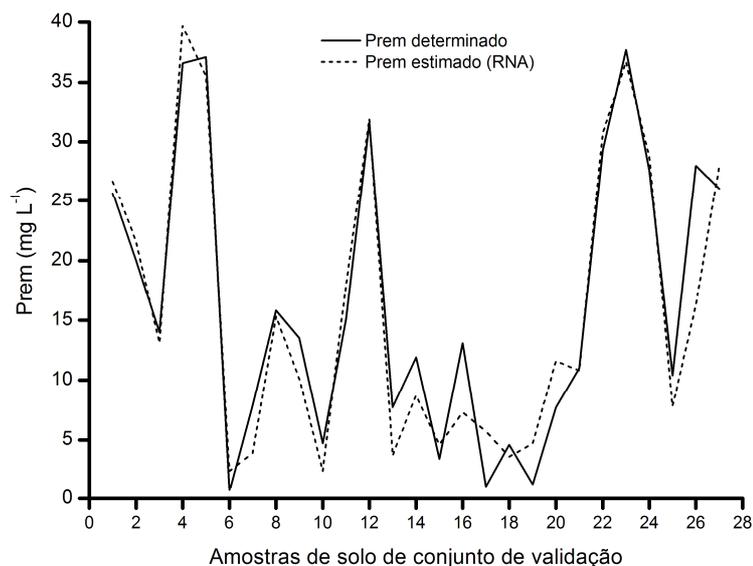


Figura 11 – Comparação entre os valores de fósforo remanescente (*Prem*) determinados e estimados pela rede neural artificial 1063 (RNA1063), para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.

As curvas do *Prem* determinado e estimado pela RNA1063 são bastante semelhantes, em alguns momentos a curva do *Prem* estimado acompanha a curva do *Prem* determinado, gerando erros pequenos, e em outros momentos os erros gerados são maiores. A similaridade entre os valores calculados (x) pela RNA1063 e os conhecidos (y), foi analisada por meio dos resultados obtidos com a regressão linear simples entre esses conjuntos de valores (Tabela 09). A equação obtida é do tipo $y = a + bx$ e quanto mais próximo de zero for o valor de a , mais próximo de 1 for o valor de b e maior for o valor de R^2 melhor é a capacidade da função de pedotransferência em estimar o *Prem*. Com relação aos intervalos de confiança de a e de b , quanto menor a amplitude melhor, o parâmetro a deve conter o valor 0 e para o b o valor 1.

Tabela 09 – Resultados da regressão linear simples entre os valores de fósforo remanescente determinados ($Prem_d$) e os estimados ($Prem_e$) pela rede neural artificial 1063 (RNA1063).

Equação ⁽¹⁾	IC- a ⁽²⁾	IC- b ⁽³⁾	R^2 ⁽⁴⁾	SQR ⁽⁵⁾
$Prem_d = 1,47 + 0,94 Prem_e$	-0,8396 - 3,7740	0,8238 - 1,0566	0,9138	300,8

⁽¹⁾ $y = a + bx$. ⁽²⁾ Intervalo de confiança calculado a 95% para o coeficiente linear a . ⁽³⁾ Intervalo de confiança calculado a 95% para o coeficiente angular b . ⁽⁴⁾ Coeficiente de determinação ajustado ao modelo. ⁽⁵⁾ Soma do quadrado das diferenças entre os valores conhecidos e estimados pela RNA1063.

O valor do coeficiente angular (b) da equação é próximo de 1 e o intervalo de confiança, calculado a 95%, inclui esse valor; do mesmo modo, o intervalo de confiança para o coeficiente linear (a) inclui o valor zero. O coeficiente de determinação encontrado ajustado ao modelo foi 0,9138, significando que 91% da variação total é explicada pelo modelo. De

acordo com o exposto, pode-se dizer que os conjuntos de dados são similares e, conseqüentemente, a função de pedotransferência baseada em redes neurais apresentou uma boa capacidade de estimar o Prem. A relação entre o Prem determinado e o estimado pela rede neural artificial 1063 durante a etapa de validação está apresentada na Figura 12.

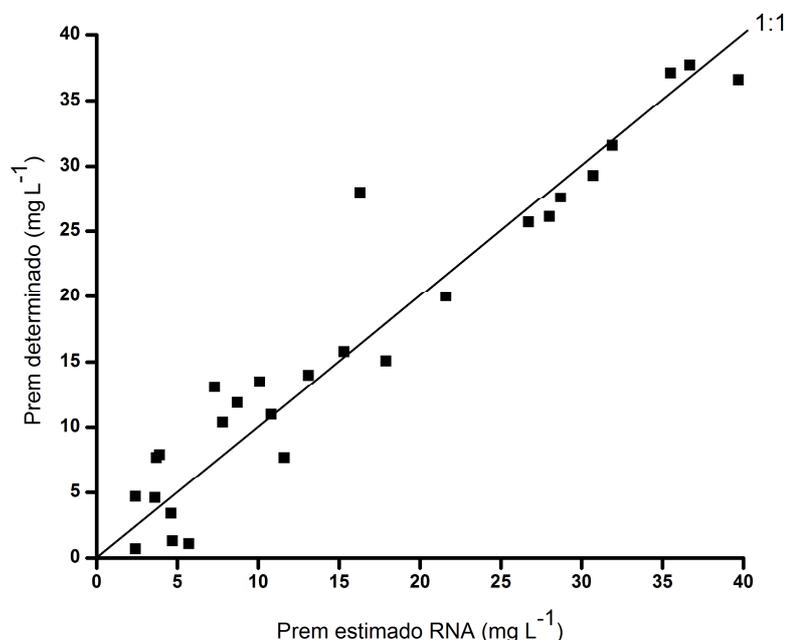


Figura 12 – Diagrama de dispersão dos valores de fósforo remanescente (Prem) determinados e estimados, por meio da rede neural artificial (RNA) 1063, para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.

Os pontos do diagrama de dispersão apresentam-se dispostos próximos da reta 1:1, significando que os valores estimados pela rede neural foram similares aos medidos. A proximidade do R^2 da unidade, para a equação apresentada na Tabela 09, também confirmou a qualidade do ajuste do modelo de regressão e, portanto, a similaridade dos conjuntos.

Os erros ou resíduos gerados a partir da estimativa de Prem realizada pela rede neural, ou seja, a diferença entre os valores de Prem estimados pela RNA1063 e os valores determinados estão apresentados na Figura 13. O maior erro gerado pela rede na etapa de validação foi para a amostra 26, onde a diferença entre o valor do Prem determinado e do estimado pela rede foi de 11,7, para as demais amostras o erro variou de -4,6 a 5,8. Os maiores erros apresentam-se distribuídos dentro da faixa de valores de Prem de 4,7 a 28,0 mg L⁻¹. A soma dos quadrados dos resíduos para as 27 amostras do conjunto de validação foi de 300,8.

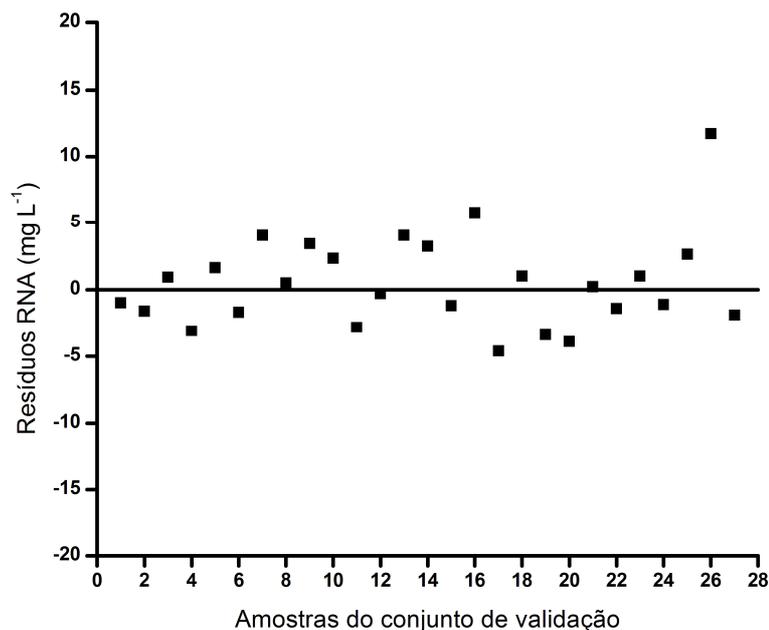


Figura 13 – Diagrama de dispersão dos resíduos gerados por meio das diferenças entre os valores de fósforo remanescente (P_{rem}) determinado e os valores estimados pela rede neural artificial (RNA) 1063, para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.

5.2.3 ANÁLISE DE REGRESSÃO LINEAR MÚLTIPLA

A estimativa do P_{rem} através de regressão linear múltipla foi realizada a partir das variáveis pH NaF, SB e Al^{3+} . Porém, a regressão linear múltipla resultou em coeficiente não significativo para Al^{3+} ($P > t > 0,05$), significando que não há relação entre a variável dependente e a independente e por esta razão, a equação obtida para estimar o P_{rem} teve como variáveis independentes apenas o pH NaF e SB (Tabela 10). O ajuste da equação foi obtido a partir dos mesmos 70% dos dados utilizados na etapa de treinamento da rede neural artificial 1063.

Tabela 10 – Resultados da análise de regressão linear múltipla para estimar o fósforo remanescente (P_{rem}) a partir dos atributos do solo pH medido em fluoreto de sódio (pH NaF) e soma de bases (SB), para o conjunto de ajuste formado por 70% dos dados.

Coefficiente ⁽¹⁾	Valor	Erro Padrão ⁽²⁾	t ⁽³⁾	$P > t$ ⁽⁴⁾
a_0	263,59	11,99	21,98	<0,0001
a_1	-25,58	1,23	-20,83	<0,0001
a_2	-0,28	0,12	-2,44	0,0178

⁽¹⁾ $P_{rem} = a_0 + a_1(\text{pH NaF}) + a_2(\text{SB})$. ⁽²⁾ Precisão das estimativas dos coeficientes para o conjunto de dados utilizado. ⁽³⁾ Teste t .

O alumínio trocável não apresentou correlação linear com o Prem e possivelmente por este motivo, não auxilia na explicação da variação do Prem juntamente com as demais variáveis, pH NaF e SB. Ao contrário, para a rede neural esta variável foi importante, o que sugere que a relação entre o Prem e o Al^{3+} pode ser não-linear e portanto não pode ser explicada a partir de modelos lineares. Este fato por si corrobora no sentido de que as redes neurais artificiais conseguem extrair informações não explícitas no conjunto de dados apresentado. O sinal negativo da variável soma de bases (SB) pode estar relacionado ao fato de que solos com elevada saturação por bases apresentam via de regra maiores valores de pH, condição essa desfavorável à sorção de P (Novais & Smith, 1999).

A equação, gerada pela análise de regressão linear múltipla, que relaciona os valores de pH NaF e SB com o Prem foi testada com um conjunto de dados formado por 30% dos dados totais, o mesmo utilizados na etapa de validação da rede neural artificial 1063. Os valores de Prem estimados pela regressão linear múltipla e os determinados, para o conjunto de dados de validação, estão apresentados na Figura 14.

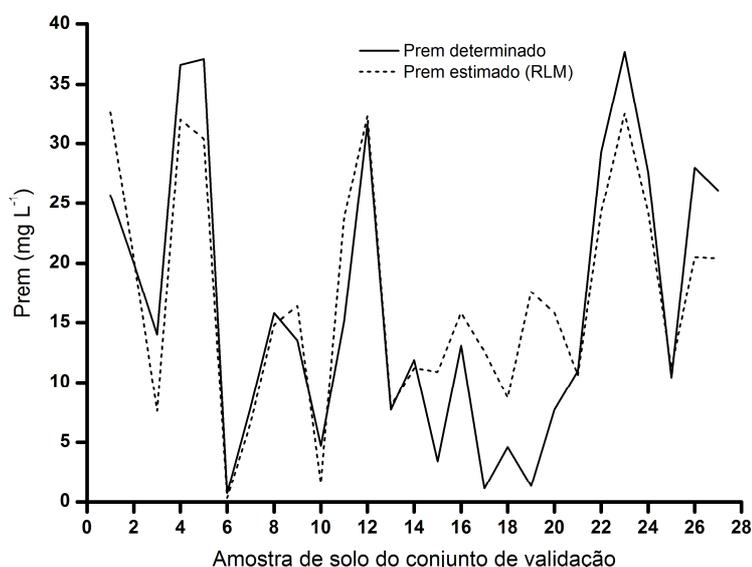


Figura 14 – Comparação entre os valores de fósforo remanescente (Prem) determinados e estimados pela análise de regressão linear múltipla (RLM), para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.

A estimativa de Prem realizada por meio de regressão linear múltipla apresentou valores menos semelhantes aos de Prem determinados (Tabela 11 e Figura 15). A similaridade entre os dois conjuntos de dados foi avaliada utilizando uma regressão linear simples entre os valores determinados (y) e os estimados pela regressão linear múltipla (x). A equação gerada pela regressão linear simples e os resultados dessa regressão estão apresentados na Tabela 11.

Tabela 11 – Resultados da regressão linear simples entre os valores de fósforo remanescente determinados ($Prem_d$) e os estimados ($Prem_e$) pela análise de regressão linear múltipla.

Equação ⁽¹⁾	IC- a ⁽²⁾	IC- b ⁽³⁾	R^2 ⁽⁴⁾	SQR ⁽⁵⁾
$Prem_d = -2,00 + 1,07 Prem_e$	-7,0338 – 3,0307	0,8171 – 1,3327	0,7366	919,50

⁽¹⁾ $y = a + bx$. ⁽²⁾ Intervalo de confiança calculado a 95% para o coeficiente linear a . ⁽³⁾ Intervalo de confiança calculado a 95% para o coeficiente angular b . ⁽⁴⁾ Coeficiente de determinação ajustado ao modelo. ⁽⁵⁾ Soma do quadrado das diferenças entre os valores conhecidos e estimados pela regressão múltipla.

O valor do coeficiente angular (b) da equação foi próximo de 1 e o intervalo de confiança, calculado a 95% inclui esse valor. O coeficiente linear (a) foi próximo de zero, porém, o coeficiente linear da equação de regressão obtida entre os valores de $Prem$ determinados e estimados pela RNA é mais próximo de zero. O coeficiente de determinação encontrado foi 0,7366, indicando que os conjuntos são menos similares do que os conjuntos de valores de $Prem$ determinados e estimados pela RNA. A soma do quadrado das diferenças entre os valores medidos de $Prem$ e seus respectivos valores estimados pela FPT foi alto, cerca de três vezes maior do que o obtido pela rede neural para o mesmo conjunto de dados. A amplitude dos intervalos de confiança, tanto para a quanto para b , foram maiores do que aqueles apresentados pela rede neural.

A Figura 15 apresenta a relação entre os valores de fósforo remanescente estimados pela regressão linear múltipla e os determinados.

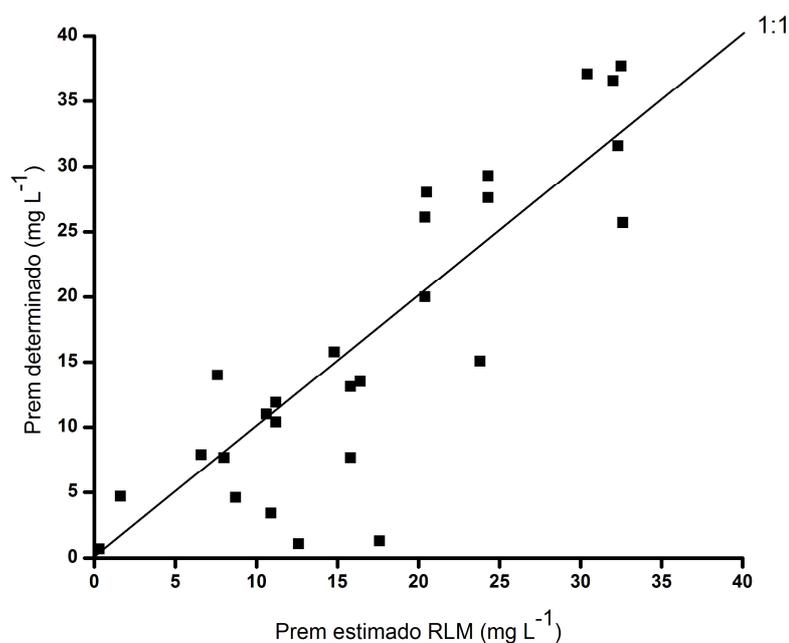


Figura 15 – Diagrama de dispersão dos valores de fósforo remanescente ($Prem$) determinados e estimados, por meio de análise de regressão linear múltipla (RLM), para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.

Na Figura 15 os pontos apresentaram uma dispersão maior no entorno da reta 1:1 do que os estimados pela RNA, significando que os valores estimados pela RLM foram menos similares aos determinados. Este fato pode ser confirmado por meio da avaliação dos resíduos gerados pela estimativa da regressão linear múltipla. A diferença entre os valores de Prem determinados e os estimados são maiores do que aqueles gerados pela rede neural (Figura 16). O maior erro gerado pela rede na etapa de validação foi para a amostra 19, onde a diferença entre o valor do Prem determinado e do estimado pela rede foi de -18,5, para as demais amostras o erro variou de -11,0 a 7,7.

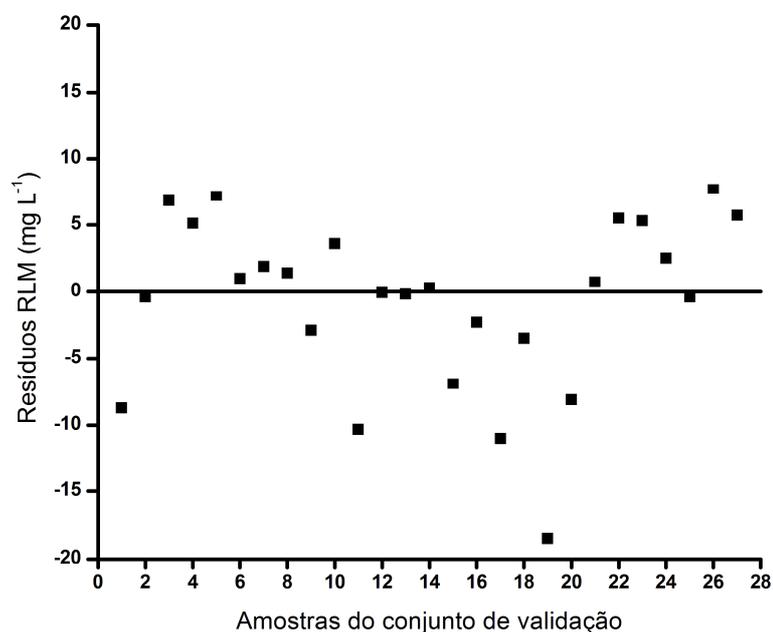


Figura 16 – Diagrama de dispersão dos resíduos gerados por meio das diferenças entre os valores de fósforo remanescente (Prem) determinado e os valores estimados pela análise de regressão linear múltipla (RLM), para o conjunto de validação formado por 30% das amostras.

A superioridade das RNA em relação à RLM para estimar o Prem pode estar associada ao fato de que as redes conseguem aproximar relações entre as variáveis entrada-saída que muitas vezes são desconhecidas. Outro motivo pode estar associado à presença de erros associados a etapa de obtenção dos dados. As RNAs são menos vulneráveis aos dados aproximativos e/ou à presença de dados distorcidos, pois possuem a capacidade de manipular informações aproximadas e até mesmo inexatas.

Apesar das estimativas realizadas apresentarem erros, estes podem ser considerados aceitáveis ou não em função da aplicação que se dará ao Prem. De acordo com o Alvarez V. *et al.* (2000) o Prem pode ser utilizado para definir as classes de fertilidade e os níveis críticos de fósforo, enxofre e zinco; estimar o valor do poder tampão do solo para a determinação da

necessidade de calagem e estimar a necessidade de gesso dos solos. Tais definições e estimativas são realizadas com base nos valores de Prem, de acordo com equações ou faixas de concentração, listadas a seguir: 0 a 4; 4 a 10; 10 a 19; 19 a 30; 30 a 44; e 44 a 60 mg L⁻¹.

O número de estimativas da RNA que permaneceram dentro da mesma faixa de valor (Alvarez V. *et al.* 2000) do Prem determinado foi de 19, ou seja, cerca de 70% do conjunto de amostras. Neste aspecto, a regressão linear múltipla apresentou um número maior de estimativas que permaneceram na mesma faixa de valor que o Prem determinado, do que a RNA1063 cujo resultado foi de 59%.

Contudo, os resultados obtidos para a *SQR* e *R*² a partir da rede neural artificial foram melhores do que aqueles obtidos através da regressão. Isso quer dizer que embora a regressão tenha gerado uma estimativa cujos valores de Prem estimados e calculados permaneceram mais dentro da mesma faixa, a RNA gerou estimativas mais próximas dos valores medidos. Esse fato é importante para o caso de cálculos baseados em valores discretos de Prem como os dos níveis críticos de fósforo, enxofre e zinco, do fator de tamponamento Y da equação do cálculo da necessidade de calagem e da dose de gesso conforme as equações de regressão apresentadas no trabalho de Alvarez V. *et al.* (2000).

Para que a função de pedotransferência seja útil, é importante que os valores de Prem por ela estimados sejam os mais próximos dos medidos, pois a partir deles é que se determinará, por exemplo, a necessidade a ser suprida em subsuperfície de fósforo, calcário e de gesso de um determinado solo. A estimativa de cálcio, para o solo da amostras 18, subsidia os cálculos da quantidade de gesso a ser adicionada neste solo. Os cálculos foram realizados a partir dos valores de Prem determinados e estimados por meio de redes neurais artificiais e regressão linear múltipla, de acordo Alvarez V. *et al.* (1999b) (Tabela 12). A quantidade de cálcio foi estimada a partir das mesmas faixas de valores usadas por Alvarez V. *et al.* (2000) e também de forma contínua através de uma equação que é função do Prem.

Tabela 12 – Estimativa da necessidade de cálcio no solo, para as amostras do conjunto de validação, a partir de valores de fósforo remanescente (Prem) determinados e estimados por meio de rede neural artificial (RNA) e regressão linear múltipla (RLM).

Número da Amostra ⁽¹⁾	Prem	Valor (mg L ⁻¹)	Necessidade de Ca ²⁺ (kg ha ⁻¹)	
			Faixas de Prem ⁽²⁾	Equação ⁽³⁾
18	Determinado	1,3	315 a 250 (293,9)	280,00
18	Estimado RNA	4,7	250 a 190 (243,0)	238,63
18	Estimado RLM	19,8	135 a 85 (131,4)	132,07

⁽¹⁾ Amostras do conjunto de validação. ⁽²⁾ Faixas de valores de Prem de acordo com Alvarez V. *et al.* (2000 e 1999b). ⁽³⁾ Ca = 315,8 – 25,5066 (Prem)^{0,5} – 5,70675 (Prem) + 0,485335 (Prem)^{1,5} (Alvarez V. *et al.* 1999b).

A partir dos resultados apresentados na tabela pode-se concluir que o uso da equação resulta em quantidades mais exatas de Ca^{2+} a serem aplicadas no solo. Porém, se o erro da estimativa do Prem for grande, a recomendação será superdimensionada ou subdimensionada, neste caso subdimensionada, independentemente do método utilizado.

A predição do fósforo remanescente a partir de outros atributos do solo, como o pH medido em solução de fluoreto de sódio (pH NaF), a soma de bases (SB) e o alumínio trocável (Al^{3+}), utilizando uma rede neural artificial, pode ser denominada de função de pedotransferência. A variável predita pela rede neural é de fácil e rápida determinação, apesar de não ser um parâmetro de rotina em análises de solo. As variáveis preditoras, soma de bases e alumínio trocável, são parâmetros analisados rotineiramente e apesar de não serem de determinação mais fácil do que o Prem são parâmetros importantes na determinação da fertilidade do solo. A soma de bases ($\text{SB} = \text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+} + \text{K}^+ + \text{Na}^+$) é um importante índice de fertilidade do solo e o alumínio trocável, um importante índice de acidez do solo. Quanto maior o valor do alumínio trocável no solo maior é a acidez do solo. Ao contrário da soma de bases e do alumínio trocável, o pH NaF não é uma análise de rotina, mas é de fácil e rápida medição, podendo ser realizado até com pHmetro portátil, segundo Gilkes & Hughes (1994).

6 CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

A função de pedotransferência proposta cumpre o princípio de eficiência descrito por Budiman *et al.* (2003). As variáveis preditoras soma de bases (SB) e teor de alumínio trocável (Al^{3+}) são atributos obrigatórios para a caracterização da fertilidade do solo e rotineiramente determinados. Por essa razão podem ser convenientemente aproveitadas também para a estimativa do fósforo remanescente juntamente com o valor de pH medido em solução de NaF 1 mol L^{-1} que, apesar de ainda não ser um atributo pedológico determinado rotineiramente no Brasil apresenta determinação mais fácil e rápida que o Prem.

Com relação ao princípio da incerteza, no que tange ao modelo utilizado, pode-se dizer que este também foi alcançado. O uso de redes neurais para o desenvolvimento de funções de pedotransferência se dá em duas etapas, uma de treinamento e outra de validação, sendo que o conjunto de dados utilizado na etapa de validação é diferente daquele utilizado na etapa de treinamento, garantindo uma maior confiabilidade das estimativas de Prem realizadas. Além disso, o uso de outros modelos matemáticos, como é o caso da análise de regressão linear múltipla comprovam a qualidade dos resultados obtidos através das redes neurais.

O uso das redes neurais artificiais proporcionou melhores estimativas para o Prem do que a análise de regressão linear múltipla considerando-se um mesmo conjunto de dados e de variáveis preditoras.

A determinação do fósforo remanescente pode ser substituída pela medida de pH NaF que, por sua vez, ao ser empregado como variável preditora do Prem tem amplificada sua capacidade de discriminar propriedades como as capacidades tampão de fosfato e de sulfato do solo, podendo também ser melhor utilizado para recomendações de doses de calcário e gesso agrícola.

A rede com o melhor desempenho nas etapas de treinamento e validação foi obtida através do uso do algoritmo *resilient backpropagation* que é uma variação do algoritmo *backpropagation*, função de ativação sigmoideal logística em todas as camadas e intervalo de dados normalizado entre [0;1]. A etapa de treinamento foi encerrada com 21 ciclos através do critério de parada antecipada, garantindo com isso um bom ajuste dos parâmetros livres da rede. A arquitetura composta por uma única camada intermediária formada por quatorze neurônios e um neurônio na camada de saída foi suficiente para representar a relação existente entre as variáveis de entrada e saída da rede neural artificial.

O desenvolvimento de um banco de dados que contemple valores de soma de bases e de teores de alumínio trocável juntamente com valores de Prem e pH NaF permitiria o conveniente aproveitamento extra dos valores de SB e Al^{3+} juntamente com valores de pH NaF para o desenvolvimento de uma função de pedotransferência abrangente para o cálculo imediato de valores de Prem suficientemente exatos com vistas ao manejo químico dos solos agrícolas.

Como sugestões para estudos futuros indicam-se:

- desenvolvimento de modelos mais restritos baseados em redes neurais artificiais para estimar o fósforo remanescente utilizando-se apenas determinada classe e/ou horizonte de solo;
- desenvolvimento de modelos mais abrangentes baseados em redes neurais artificiais para estimar o fósforo remanescente englobando-se quantidades de amostras iguais para todas as classes e/ou horizontes utilizados.

7 REFERÊNCIAS

AFIF E., BARRÓN V., TORRENT J. 1995. Organic matter delays but does not prevent phosphate sorption by cerrado soils from Brazil. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **159**:207-211.

AGYARE W.A, PARK S.J., VLEK P.L.G. 2007. Artificial neural network estimation of saturated hydraulic conductivity. *Vadose Zone J.*, **6**:423-431.

ALVAREZ V. V.H., NOVAIS R.F. de, BARROS N.F. de, CANTARUTTI R.B., LOPES A.S. 1999a. Interpretação dos resultados das análises de solos. In: A.C. RIBEIRO, P.T.G. GUIMARÃES, V.H. ALVAREZ V. (eds.) *Recomendações para o uso de corretivos e fertilizantes em Minas Gerais – 5ª aproximação*. UFV, Viçosa, p.:25-36.

ALVAREZ V. V.H., DIAS L.E., RIBEIRO A.C., SOUZA R.B. 1999b. Uso do gesso agrícola. In: A.C. RIBEIRO, P.T.G. GUIMARÃES, V.H. ALVAREZ V. (eds.) *Recomendações para o uso de corretivos e fertilizantes em Minas Gerais – 5ª aproximação*. UFV, Viçosa, p.:67-78.

ALVAREZ V. V.H. & RIBEIRO A.C. 1999. Calagem. In: A.C. RIBEIRO, P.T.G. GUIMARÃES, V.H. ALVAREZ V. (eds.) *Recomendações para o uso de corretivos e fertilizantes em Minas Gerais – 5ª aproximação*. UFV, Viçosa, p.:43-60.

ALVAREZ V. V.H., NOVAIS R.F., DIAS L.E., OLIVEIRA J.A. 2000. Determinação e uso do fósforo remanescente. *Boletim da Sociedade Brasileira de Ciência do Solo*, **25**:27-32.

ALVES M.E. 2002. Atributos mineralógicos e eletroquímicos, adsorção e dessorção de sulfatos em solos paulistas. Tese de Doutorado, Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, 154 p.

ALVES M.E. & LAVORENTI A. 2004a. Remaining phosphorus and sodium fluoride pH in soils with different clay contents and clay mineralogies. *Pesq. Agropec. Bras.*, **39**:241-246.

ALVES M.E. & LAVORENTI A. 2004b. Clay mineralogy effects on sodium fluoride pH of non-allophanic tropical soils. *Aust. J. Soil Res.*, **42**:865-87.

ALVES M.E. & LAVORENTI A. 2006. Remaining phosphorus estimate through multiple regression analysis. *Pedosphere*, **16**:566-571.

BACHE B.W. & WILLIAMS E.G. 1971. A phosphate sorption index for soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **22**:209-301.

BOLLAND M.D., GILKES R.J., BRENNAN R.F., ALLEN D.G. 1996. Comparison of seven phosphorus sorption indices. *Aust. J. Soil Res.*, **34**:81-89.

BORGGGAARD O.K., SZILAS C., GIMSING A.L., RASMUSSEN L.H. 2004. Estimation of soil phosphate adsorption capacity by means of pedotransfer function. *Geoderma*, **118**:55-61.

BRAGA A.de P., CARVALHO A.P. de L.F. de, LUDERMIR T.B. 2000. *Redes neurais artificiais: teoria e aplicações*. CTC, Rio de Janeiro, 262p.

BRAGA A.P., LUDERMIR T.B., CARVALHO A.P.L.F. 2007. *Redes neurais artificiais: teoria e aplicações*. LTC, Rio de Janeiro, 2 ed, 226 p.

BUDIMAN M., McBRATNEY A.B., MENDONÇA-SANTOS M.L., SANTOS H.G. 2003. *Documento 45*. Revisão sobre funções de pedotransferência (PTFs) e novos métodos de predição de classes e atributos do solo. Embrapa Solos, Rio de Janeiro, 50 p.

DEMUTH A.B., BEALE M., HAGAN M. 2008. Neural network toolbox: user's guide. Ver. 6. Disponível em: http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/pdf_doc/nnet/nnet.pdf. Acessado em 03 set 2008.

DONAGEMMA G.K., RUIZ H.A., ALVAREZ V. V.H., KER J.C., FONTES M.P.F. 2008. Fósforo remanescente em argilas e silte retirados de latossolos após pré-tratamento na análise textural. *R. Bras. Ci. Solo*, **32**:1785-1791.

EMPRESA BRASILEIRA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA – EMBRAPA. 1997. *Manual de métodos de análises de solos*. Ministério da Agricultura e do Abastecimento, Rio de Janeiro, 2 ed., 212 p.

EMPRESA BRASILEIRA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA – EMBRAPA. 2006. *Sistema brasileiro de classificação de solos*. Embrapa Solos, Rio de Janeiro, 2 ed., 306 p.

FALCÃO N.P. de S., SILVA J.R.S. da. 2004. Características de adsorção de fósforo em alguns solos da Amazônia Central. *Acta Amazônia*, **34**: 337-342.

FERNEDA E. 2006. Redes neurais e sua aplicação em sistemas de recuperação de informação. *Ci. Inf.*, **35**:25-30.

GILKES R.J. & HUGHES J.C. 1994. Sodium fluoride pH of South-Western Australian Soils as an indicator of P-sorption. *Aust. J. Soil Res.*, **32**:755-766.

HAIR JR., J.F.; ANDERSON, R.E.; TATHAM, R.L. BLACK W.C. 2005. *Análise multivariada de dados*. 5 ed. Bookman, Porto Alegre, 593 p.

HAYKIN S. 2001. *Redes neurais: princípios e práticas*. Bookman, Porto Alegre, 2 ed., 900 p.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA – IBGE. Estados@. Disponível em: <http://www.ibge.gov.br/estadossat/perfil.php?sigla=sp>. Acessado em 03 set. 2009.

JANA R.B., MOHANTY B.P., SPRINGER E.P. 2007. Multiscale pedotransfer functions for soil water retention. *Vadose Zone J.*, **6**:868-878.

LEVINE D.M., BERENSON M.L., STEPHAN D. 1998. *Estatística: teoria e aplicações usando microsoft® excel em português*. LTC, Rio de Janeiro, 811 p.

LUGER G.F. 2004. *Inteligência artificial: estruturas e estratégias para a solução de problemas complexos*. Bookman, Porto Alegre, 4 ed.

MEKARU T. & UEHARA G. 1972. Anion adsorption in ferruginous tropical soils. *Soil Science Society of America Proceedings*. **39**:296-300.

MOTT C.J.B. 1981. Anion and ligand Exchange. *In*: D.J. Greenland and M.H.B. Hayes (eds.) *The Chemistry of Soil Processes*. John Wiley & Sons, New York, p.: 179-219.

NOVAIS R.F. & SMITH T.J. 1999. *Fósforo no solo e na planta em condições tropicais*. Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Solos, Viçosa, 399p.

OLIVEIRA J.B.de, CAMARGO M.N.de, ROSSI M., CALDERANO FILHO B. Mapa pedológico do estado de São Paulo. 2002. Carta. Escala 1:750.000.

PARASURAMAN K., ELSHORBAGY A., SI B.C. 2006. Estimating saturated hydraulic conductivity in spatially variable fields using neural network ensembles. *Soil. Sci. Soc. Am. J.*, **70**:1851-1859.

PARASURAMAN K., ELSHORBAGY A., SI B.C. 2007. Estimating saturated hydraulic conductivity using genetic programming. *Soil. Sci. Soc. Am. J.*, **71**:1676-1684.

RIBEIRO JUNIOR J.I. 1966. *Análises estatísticas no excel: guia prático*. UFV, Viçosa, 251 p.

RAIJ B. VAN, ANDRADE J.C. de, CANTARELLA H., QUAGGIO J. A. 2001. *Análise química para avaliação da fertilidade de solos tropicais*. Instituto Agrônomo, Campinas, 285p.

RESENDE M., CURI N., KER J.C., REZENDE S.B. 2005. *Mineralogia de solos brasileiros – Interpretação e Aplicações*. Editora UFLA, Lavras, 192p.

SCHWERTMANN U. & HERBILLON A.J. 1992. Some aspects of fertility associated with the mineralogy of highly weathered tropical soils. In: R. Lal and P.A. Sanchez (eds.) *Myths and Science of Soils of the Tropics*. SSSA Special Publication 29. Wisconsin, USA, p.:47-59.

SILVA A.N.R. da., RAMOS R.A.R., SOUZA L.C.L. de, MENDES J.F.G. 2004. *SIG: Uma plataforma para introdução de técnicas emergentes no planejamento urbano, regional e de transportes*.

SILVA A.P da, TORMENTA C.A., FIDALSKI J., IMHOFF S. 2008. Funções de pedotransferência para as curvas de retenção de água e de resistência do solo à penetração. *R. Bras. Ci. Solo*, **32**:1-10.

SINGH B. & GILKES R.J. 1991. Phosphorus sorption in relation to soil properties for the major soil types of South-Western Australia. *Aust. J. Soil Res.*, **29**:603-618.

SOMARATNE S., SENEVIRATNE G., COOMARASWAMY U. 2005. Prediction of soil organic carbon across different land-use patterns: a neural network approach. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **69**:1580-1589.

STRECK E.V., KAMPF N., DALMOLIN R.S.D., KLAMT E., NASCIMENTO P.C., SCHNEIDER P., GIASSON E., PINTO L.F.S. 2008. *Solos do Rio Grande do Sul*. EMATER, Ascar/RS, 2 ed., 222 p.

TAFNER M.A., XEREX M. de, RODRIGUES FILHO I.W. 1996. *Redes neurais artificiais: introdução e princípios de neurocomputação*. Eko, Blumenau, 199 p.

VALENÇA M.J.S. & LUDERMIR T.B. 1999. Introdução às redes neurais. *In*: C. de O. GALVÃO & M.J.S. VALENÇA (orgs.). *Sistemas inteligentes: aplicações a recursos hídricos e ciências ambientais*. UFRGS; ABRH, Porto Alegre, 1 ed., 246 p.

VALLADARES G.S., PEREIRA M.G., ANJOS L.H.C. 2003. Adsorção de fósforo em argilas de baixa atividade. *Bragantia*, **62**:111-118.

VERONEZ M.R., THUM A.B., LUZ A.S., SILVA D.R. da. 2006. Artificial neural networks applied in the determination of soil surface temperature – SST. *In*: 7th International Symposium on Spatial Accuracy Assessment in Natural Resources and Environmental Sciences. Lisboa, p. 889-898.

ZACHARIAS S. & WESSOLEK G. 2007. Excluding organic matter content from pedotransfer predictors of soil water retention. *Soil. Sci. Soc. Am. J.*, **71**:43-50.

WANG M.X., LIU G.D., WU W.L., BAO Y.H., LIU W.N. 2006. Prediction of agriculture derived groundwater nitrate distribution in North China Plain with GIS-based BPNN. *Environ. Geol.*, **50**:637-644.

ANEXO A – CLASSIFICAÇÃO, LOCALIZAÇÃO, PROFUNDIDADE E MATERIAL DE ORIGEM DAS AMOSTRAS DE SOLO

Amostra	Classificação ⁽¹⁾	Localização	Horizonte	Profundidade da amostragem (cm)	Material de Origem
1	nd.	Jundiaí	B22	62-80	Gnaisse
2	Latossolo Vermelho-Amarelo	Jundiaí	B22	74-200	Gnaisse
3	Neossolo	Jundiaí	II B2	53-90	Gnaisse
4	Argissolo Vermelho-Amarelo	Jundiaí	II B22	85-200	Gnaisse
5	Argissolo Vermelho-Amarelo	Jundiaí	II B22	68-77	Gnaisse
6	Neossolo	Jundiaí	B	37-60	Xisto
7	Latossolo Vermelho-Amarelo	Jundiaí	B1	120-170	nd.
8	Neossolo	Nazaré Paulista	B	15-35	Granito
9	Latossolo Vermelho-Amarelo	Socorro	II B2	150-190	Sedimentos Coluvionares
10	Neossolo	Socorro	II B	30-60	Gnaisse
11	Gleissolo	Socorro	C1	36-59	Sedimentos Aluvionais
12	Argissolo Vermelho-Amarelo	Socorro	II B22t	20-35	Gnaisse
13	Argissolo Vermelho-Amarelo	Socorro	II B2	40-61	Gnaisse
14	Latossolo Vermelho-Amarelo	Nazaré Paulista	B22	100-200	Gnaisse
15	nd.	Nazaré Paulista	B22	60-76	Xisto
16	Argissolo	Nazaré Paulista	B22	45-78	Granito
17	Argissolo Vermelho-Amarelo	Socorro	II B22	38-67	Gnaisse
18	Argissolo Vermelho-Amarelo	Nazaré Paulista	B2	26-44	Gnaisse
19	Argissolo	Nazaré Paulista	II B2	16-46	Granito
20	Gleissolo	Nazaré Paulista	C1G	25-70	Sedimentos Aluvionais
21	Argissolo Vermelho-Amarelo	Nazaré Paulista	H	300-380	Granito e Gnaisse
22	Argissolo Amarelo	Nazaré Paulista	B22	62-100	Gnaisse
23	Latossolo Vermelho	nd.	E	60-92	Sedimentos Quaternários
24	Latossolo Vermelho	nd.	D	80-130	Sedimentos Quaternários
25	Nitossolo Vermelho	nd.	C	38-60	Sedimentos Quaternários
26	Latossolo Vermelho	nd.	D	45-105	Sedimentos Quaternários
27	Nitossolo vermelho	nd.	B	10-27	Sedimentos Quaternários
28	nd.	Pindorama	B22	100-180	Arenito
29	Argissolo Vermelho-Amarelo	Pindorama	A22	30-56	Arenito
30	nd.	Pindorama	A22	47-65	Arenito
31	nd.	Pindorama	B22	45-77	Arenito
32	nd.	Pindorama	A22X	48-51	Arenito
33	nd.	Pindorama	B22	118-155	nd.
34	Latossolo Vermelho	Monte Alto	B21	78-97	Basalto
35	Latossolo Vermelho	Monte Alto	A1	0-14	Basalto
36	Latossolo Vermelho	Monte Alto	B22	120-150	Basalto
37	nd.	nd.	B22	100-150	Arenito
38	Latossolo Amarelo	Itararé	B21	90-117	nd.
39	Latossolo Amarelo	Itararé	B22	150-180	nd.
40	Plintossolo Pétrico	Itararé	A1	0-12	nd.
41	Cambissolo Háplico	Itararé	B2	50-70	nd.
42	Latossolo Amarelo	Itararé	B21	105-160	nd.
43	Latossolo Amarelo	Itararé	B21	140-170	nd.
44	nd.	nd.	B3	nd.	nd.
45	Latossolo Vermelho-Amarelo	nd.	B22	106-150	Arenito
46	Latossolo Vermelho Escuro	nd.	B22	97-140	Argilito
47	Latossolo Vermelho	nd.	B22	147-170	Argilito
48	Latossolo Vermelho	nd.	B21	200-240	Argilito
49	Plintossolo	Ribeirão Bonito	B22cn	54-75	Argilito
50	Neossolo	Dourado	B22	125-240	Arenito
51	Chernossolo	Santa Ernestina	B22t	60-112	Basalto
52	Latossolo Vermelho	Guariba	B2	24-90	nd.
53	Latossolo Vermelho	Guariba	B22	120-170	Basalto
54	Latossolo Vermelho-Amarelo	Guatapará	B22	125-170	Basalto
55	Latossolo Vermelho-Amarelo	Pitangueiras	B22	90-130	Argilito
56	Neossolo	Dobrada	C2	75-100	Arenito
57	Latossolo Vermelho-Amarelo	nd.	BW2	54-86	Argilito
58	Latossolo Vermelho-Amarelo	nd.	BW1	50-93	Argilito
59	nd.	nd.	BWF1	88-113	Argilito
60	Latossolo Vermelho	nd.	BW2	100-160	Argilito
61	Luvissolo	Votuporanga	Bt1	51-82	Arenito
62	Cambissolo Eutrófico	Votuporanga	Bi	29-42	Arenito
63	Latossolo Vermelho-Amarelo	Avaiá	BW1	126-160	Argilito
64	Latossolo Vermelho-Amarelo	Avaiá	BW1	93-132	nd.
65	Nitossolo	nd.	BT2	67-97	nd.
66	Argissolo Vermelho-Amarelo	Bauru	BT2	96-118	Arenito
67	Latossolo Vermelho-Amarelo	Bauru	BW2	130-200	Arenito
68	Argissolo Vermelho-Amarelo	Bauru	Bt2	38-106	Granito

Amostra	Classificação ⁽¹⁾	Localização	Horizonte	Profundidade da amostragem (cm)	Material de Origem
69	Luvissolo	Bauru	BT2	46-126	Granito
70	Argissolo Vermelho	Piratininga	BT2	44-92	Argilito
71	Luvissolo	Agudos	BW3	160-200	nd.
72	Latossolo Vermelho-Amarelo	Agudos	BW1	260-300	nd.
73	Nitossolo	nd.	BT2	62-87	Basalto
74	Latossolo Vermelho	nd.	BW2	51-93	Basalto
75	Nitossolo	nd.	BT1	33-56	nd.
76	Latossolo	nd.	BW3	118-150	Basalto
77	Nitossolo	nd.	BT2	74-105	Basalto
78	Latossolo Vermelho	nd.	BW1	42-100	Basalto
79	Latossolo Vermelho	nd.	BW2	62-100	Basalto
80	Planossolo Eutrófico	nd.	BTG3	70-92	Sedimentos Quaternários
81	Latossolo	nd.	BA	14-31	Sedimentos Continentais
82	Latossolo	nd.	BW2	115-150	Basalto
83	Latossolo Vermelho	nd.	BW2	132-200	Basalto
84	Latossolo Vermelho	Osvaldo Cruz	Bw2	80-108	Arenito
85	Latossolo Vermelho	nd.	Bw2	99-140	Arenito
86	Luvissolo	Salmourão	Bt2	64-84	Arenito
87	Latossolo Vermelho	nd.	Bw1	53-95	Basalto
88	Nitossolo	nd.	Bt2	39-75	Basalto
89	Latossolo Vermelho	nd.	Bw1	55-77	Basalto
90	Latossolo Vermelho	nd.	Bw2	104-150	Basalto
91	Neossolo	nd.	C3	124-160	Arenito
92	Luvissolo	Osvaldo Cruz	nd.	95-160	Arenito
93	Latossolo Vermelho-Amarelo	Marília	nd.	90-130	Arenito
94	Argissolo Vermelho-Amarelo	nd.	BT2	68-95	Arenito
95	Neossolo Litólico	Álvaro de Carvalho	A1	0-20	Arenito
96	Latossolo Vermelho	Jaú	Bw2	58-105	Basalto/Arenito
97	Nitossolo	Jaú	Bt2	72-108	Basalto
98	Gleissolo	Jaú	Btg2	98-150	Sedimentos Aluvionais
99	Nitossolo	Jaú	Bt2	30-63	Basalto
100	Latossolo Vermelho	Jaú	Bw2	100-200	Basalto
101	Luvissolo	Jaú	B1	30-64	Arenito
102	Latossolos Vermelho	Jaú	Bw2	75-138	Arenito
103	nd.	nd.	Bt1	15-49	nd.
104	Latossolo Vermelho	Jaú	Bw2	84-133	Arenito
105	Neossolo Flúvico	Garça	C2	85-160	Sedimentos Aluvionais
106	Argissolo Vermelho-Amarelo	nd.	BT1	68-80	Arenito
107	Argissolo Vermelho-Amarelo	Euclides da Cunha Paulista	BT2	60-100	nd.
108	Latossolos Vermelho	nd.	BW1	35-60	nd.
109	Argissolo Vermelho	nd.	BT2	40-100	nd.
110	Argissolo Vermelho	nd.	BT2	65-115	nd.
111	nd.	nd.	BT2	55-103	nd.
112	Luvissolo	nd.	BT3	103-130	nd.
113	Argissolo Vermelho	nd.	BT2	87-130	nd.
114	Argissolo Vermelho-Amarelo	Teodoro Sampaio	BA	34-55	Arenito
115	Latossolo Vermelho-Amarelo	Teodoro Sampaio	Bw1	43-68	Arenito
116	Argissolo Vermelho-Amarelo	Marabá Paulista	Bt3	161-200	Arenito
117	Argissolo Vermelho-Amarelo	Presidente Epitácio	Ap	0-15	Arenito

(1) Classificação de acordo com EMBRAPA (2006).

nd. – não informado.

ANEXO B – ATRIBUTOS FÍSICOS, QUÍMICOS, MINERALÓGICOS E ELETRÓQUÍMICOS DAS AMOSTRAS DE SOLOS

Amostra	Prem	Areia Grossa	Areia Fina	Areia Total	Silte	Argila	NaF	pH H ₂ O	KCl	ΔpH	Ca ²⁺	Mg ²⁺	K ⁺	Na ⁺	SB	Al ³⁺	H ⁺	T	H ₊ +Al	V	m	C	g kg ⁻¹			mol mol ⁻¹				
																							SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	Ki	Kr			
1	18,5	217	199	416	156	428	9,59	5,4	4,7	-0,7	0,15	0,00	0,06	0,00	0,21	2,15	2,3	4,7	4,5	4,5	4,5	91,1	5,3	202,0	204,0	61,0	1,68	1,41		
2	4,9	285	218	503	80	417	9,98	4,9	5,1	0,2	0,15	0,00	0,06	0,00	0,21	0,00	2,0	2,2	2,0	2,0	2,0	9,5	0,0	4,8	126,0	119,0	65,0	1,80	1,33	
3	25,7	277	198	475	240	285	9,01	5,5	4,6	-0,9	0,05	1,45	0,28	0,00	1,78	3,10	2,4	7,2	5,5	5,5	24,6	63,5	2,6	227,0	168,0	58,0	2,30	1,88		
4	20,0	394	136	530	63	405	9,49	5,0	4,8	-0,2	0,65	0,65	0,13	0,00	1,43	0,75	2,6	4,8	3,4	29,9	34,4	4,1	166,0	156,0	41,0	1,81	1,55			
5	21,2	232	236	468	127	405	9,53	5,3	4,9	-0,4	0,50	0,30	0,18	0,00	0,98	0,55	2,3	3,8	2,8	2,8	25,9	35,9	4,1	202,0	192,0	65,0	1,79	1,47		
6	21,6	362	251	613	149	245	9,32	4,9	4,3	-0,6	0,25	0,18	0,18	0,00	0,68	2,75	2,6	6,0	5,4	11,3	80,2	6,6	151,0	139,0	48,0	1,85	1,51			
7	7,3	232	234	466	56	478	10,15	5,0	4,4	-0,6	0,00	0,20	0,02	0,00	0,22	1,25	4,8	6,2	6,0	3,6	85,0	7,0	105,0	68,0	68,0	2,63	1,60			
8	17,2	180	300	480	169	351	9,92	4,9	4,1	-0,8	0,45	0,05	0,17	0,00	0,67	2,00	6,0	8,7	8,0	7,7	74,9	10,8	104,7	215,5	96,7	0,83	0,64			
9	1,5	195	275	470	120	410	10,11	4,5	4,5	0,0	0,85	0,00	0,12	0,00	0,97	0,40	4,7	6,0	5,1	16,1	29,2	nd.	148,5	183,6	66,3	1,38	1,12			
10	14,0	140	245	385	175	440	9,92	6,5	5,1	-1,4	7,25	0,25	0,27	0,00	7,77	0,00	7,1	14,9	7,1	52,3	0,0	8,9	193,6	217,5	93,8	1,19	1,19			
11	36,6	155	480	635	185	180	9,01	5,7	4,7	-1,0	3,30	0,40	0,06	0,00	3,76	0,00	6,5	10,3	6,5	36,6	0,0	8,3	96,8	107,1	37,1	1,54	1,26			
12	37,1	165	305	470	210	320	9,09	5,5	4,6	-0,9	1,90	0,20	0,25	0,00	2,35	0,00	3,1	5,5	3,1	43,1	0,0	5,0	167,0	160,6	51,5	1,77	1,47			
13	20,3	147	278	425	155	420	9,68	5,1	4,2	-0,9	0,55	0,10	0,08	0,00	0,73	1,85	4,0	6,6	5,9	11,1	71,7	5,3	193,6	198,6	42,3	1,66	1,46			
14	0,7	115	195	310	95	595	10,29	5,0	4,1	-0,9	0,00	0,10	0,13	0,00	0,23	0,00	4,4	4,6	4,4	5,0	0,0	5,0	188,0	279,0	88,0	1,15	0,95			
15	21,3	200	340	540	140	320	9,69	4,7	4,1	-0,6	0,00	0,10	0,03	0,00	0,13	1,95	7,6	9,6	9,5	1,3	93,8	6,2	165,0	174,0	43,0	1,61	1,39			
16	7,9	185	95	280	100	620	10,03	6,0	5,2	-0,8	1,10	0,25	0,04	0,00	1,39	0,00	2,4	3,8	2,4	36,7	0,0	6,2	228,0	294,0	72,0	1,32	1,14			
17	9,5	70	285	355	110	535	9,94	5,6	5,4	-0,2	2,20	0,20	0,04	0,00	2,44	0,00	3,4	5,8	3,4	42,1	0,0	4,8	217,8	251,9	59,5	1,47	1,28			
18	15,3	295	385	680	80	440	9,74	4,9	3,9	-1,0	0,20	0,10	0,10	0,00	0,40	2,25	3,2	5,9	5,5	6,8	84,9	6,8	174,2	197,9	41,7	1,50	1,32			
19	17,8	380	40	420	170	410	9,37	4,6	3,7	-0,9	0,15	0,05	0,09	0,00	0,29	3,00	3,0	6,2	6,0	4,6	91,2	7,2	220,8	215,0	52,0	1,75	1,51			
20	4,6	0	50	50	145	805	10,27	5,3	4,1	-1,2	2,00	0,60	0,16	0,00	2,76	5,00	10,4	18,2	15,4	15,2	64,4	14,0	358,4	328,4	35,5	1,86	1,74			
21	1,1	150	150	300	150	575	10,21	5,4	5,4	0,0	0,30	0,10	0,04	0,00	0,44	0,40	2,3	3,1	2,7	14,0	47,6	0,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	
22	21,9	175	175	350	195	455	9,49	5,1	4,7	-0,4	0,50	0,20	0,03	0,00	0,73	1,35	3,0	5,1	4,4	14,4	64,9	7,1	163,8	220,5	96,0	1,26	0,99			
23	1,1	39	131	170	85	745	10,50	4,5	4,3	-0,2	0,05	0,05	0,02	0,00	0,12	1,05	7,7	8,8	8,7	1,4	89,7	8,3	236,5	319,8	109,7	1,26	1,03			
24	5,6	57	198	255	85	660	10,20	4,6	4,0	-0,6	0,05	0,00	0,02	0,00	0,07	1,80	8,4	10,3	10,2	0,7	96,3	9,8	172,8	238,9	163,4	1,23	0,86			
25	15,8	32	168	200	140	660	9,67	5,5	5,0	-0,5	4,00	0,75	0,05	0,00	4,80	0,00	2,6	7,4	2,6	65,3	0,0	10,1	204,8	261,1	200,0	1,33	0,89			
26	1,3	60	180	240	80	680	10,45	4,5	4,2	-0,3	0,00	0,00	0,06	0,00	0,06	1,05	8,0	9,1	9,1	0,7	94,6	7,7	197,1	265,6	172,6	1,26	0,89			
27	11,7	25	165	190	135	675	9,63	0,0	0,0	0,0	2,20	0,70	0,04	0,00	2,94	0,00	6,8	9,7	6,8	30,2	0,0	9,1	211,2	241,9	196,6	1,48	0,98			
28	10,1	205	500	705	35	260	9,78	4,0	4,0	0,0	0,00	0,25	0,10	0,00	0,35	1,95	3,1	5,4	5,1	6,5	84,8	2,4	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	
29	27,5	245	565	810	30	160	9,36	4,8	3,9	-0,9	0,00	0,10	0,04	0,00	0,14	2,00	2,6	4,7	4,6	3,0	93,5	4,1	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	
30	48,0	389	486	875	50	75	8,40	6,1	5,3	-0,8	0,90	0,45	0,11	0,00	1,46	0,00	1,8	3,2	1,8	45,5	0,0	2,1	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
31	17,4	185	475	660	45	295	9,64	5,0	4,0	-1,0	2,60	0,30	0,17	0,00	3,07	1,70	3,7	8,5	5,4	36,2	35,6	4,4	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
32	48,0	299	566	865	50	85	8,41	5,6	5,3	-0,3	2,30	0,45	0,13	0,00	2,88	0,00	2,0	4,9	2,0	59,0	0,0	3,9	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
33	19,0	245	430	675	25	300	9,29	5,1	4,0	-1,1	0,00	0,60	0,05	0,00	0,65	1,10	1,8	3,5	2,9	18,6	62,9	4,2	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
34	0,0	112	208	320	190	490	10,40	6,1	6,9	0,8	1,95	0,38	0,02	0,00	2,35	0,00	4,3	6,6	4,3	35,6	0,0	7,1	110,1	273,4	228,6	0,68	0,45			
35	3,7	33	372	405	165	430	10,21	5,2	4,7	-0,5	1,75	0,74	0,06	0,00	2,55	0,00	5,8	8,4	5,8	30,5	0,0	11,8	170,0	261,6	328,0	1,10	0,61			
36	0,0	47	191	238	205	550	10,25	6,6	6,4	-0,2	1,10	0,22	0,01	0,00	1,33	0,00	2,2	3,5	2,2	38,2	0,0	2,9	120,1	290,7	285,1	0,70	0,43			
37	13,5	180	440	620	40	340	9,66	5,1	4,3	-1,2	0,10	0,00	0,01	0,00	0,11	0,70	1,6	2,4	2,3	4,6	86,4	3,0	107,0	127,0	39,0	1,43	1,20			
38	11,4	440	220	660	0	340	9,97	5,5	4,3	-0,8	0,05	0,02	0,01	0,00	0,08	0,60	3,4	4,1	4,0	2,0	88,2	5,5	66,0	116,9	21,0	0,96	0,86			
39	4,7	410	190	600	20	380	10,24	5,5	4,7	-0,8	0,05	0,02	0,01	0,00	0,08	0,10	3,7	3,9	3,8	2,1	55,6	5,3	45,6	134,7	38,5	0,58	0,49			
40	15,1	470	190	660	30	310	9,37	4,8	3,9	-0,9	0,10	0,06	0,10	0,00	0,26	2,80	8,5	11,6	11,3	2,2	91,5	26,3	56,2	106,6	37,5	0,90	0,74			
41	11,7	490	200	690	40	270	9,90	4,8	4,2	-0,6	0,05	0,02	0,01	0,00	0,08	1,00	4,1	5,2	5,1	1,9	92,6	8,0	62,8	108,0	27,0	0,68	0,59			
42	6,5	470	210	680	30	290	10,18	4,9	4,4	-0,5	0,05	0,00	0,01	0,00	0,06	0,50	2,6	3,2	3,1	1,9	89,3	4,6	43,2	108,0	27,0	0,68	0,59			
43	0,4	300	210	510	0	430	10,37	4,8	4,6	-0,2	0,10	0,02	0,01	0,00	0,13	0,40	4,3	4,8	4,7	2,7	75,5	6,8	65,2	136,8	45,0	0,81	0,67			
44	31,6	210	330	540	20	440	9,00	4,4	4,8	0,4	0,10	0,00	0,00	0,00	0,10	0,00	2,1	2,2	2,1	5,8	75,5	3,0	116,0	135,0	44,0	1,50	1,20			
45	0,0	240	550	790	20	190	10,11	4,8	4,0	-0,8	0,10	0,10	0,01	0,00	0,21	0,90	1,6	2,7	2,5	7,7	81,1	3,0	46,0	63,0	18,0	1,24	1,05			

Amostra	Prem mg L ⁻¹	Área Grossa	Área Fina	Área Total	Sílice	Argila	NaF	pH H ₂ O	KCl	ΔpH	Ca ²⁺	Mg ²⁺	K ⁺	Na ⁺	SB	Al ³⁺	H ⁺	T	H+Al	V	m	C	g kg ⁻¹			mol mol ⁻¹		
																							SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	Ki	Kr	
46	7,7	80	270	350	60	590	9,99	5,2	4,3	-0,9	0,00	0,10	0,02	0,00	0,12	0,60	4,0	4,7	4,6	2,5	83,3	6,0	148,0	174,0	71,0	1,45	1,15	
47	5,2	70	200	270	40	690	9,98	4,9	4,8	-0,1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	-	9,0	127,0	196,0	244,0	1,10	0,61
48	44,9	70	330	400	30	570	8,49	4,1	4,1	0,0	0,00	0,00	0,02	0,00	0,02	1,30	4,0	5,3	5,3	0,4	98,5	6,0	171,0	177,0	59,0	1,64	1,35	
49	11,9	150	90	240	30	730	9,86	4,5	4,0	-0,5	0,20	0,10	0,02	0,00	0,32	1,20	2,7	4,2	3,9	7,6	78,9	7,0	240,0	175,0	72,0	2,33	1,85	
50	44,6	360	570	930	0	70	8,65	4,8	4,1	-0,7	0,10	0,10	0,00	0,00	0,20	0,30	0,7	1,2	1,0	16,7	60,0	2,0	16,0	18,0	7,0	1,51	1,21	
51	4,9	40	110	150	370	480	9,61	6,5	5,3	-1,2	22,90	9,00	0,36	0,00	32,26	0,00	1,9	34,2	1,9	94,4	0,0	4,0	290,0	99,0	180,0	4,98	2,30	
52	0,2	100	120	220	280	500	10,25	5,4	5,3	-0,1	0,10	0,00	0,03	0,00	0,13	0,00	3,0	3,1	3,0	4,2	0,0	12,0	34,0	168,0	232,0	0,34	0,18	
53	3,4	300	180	480	50	470	9,87	5,5	5,5	0,0	0,60	0,10	0,02	0,00	0,72	0,00	1,3	2,0	1,3	35,6	0,0	5,0	102,0	150,0	110,0	1,16	0,79	
54	2,7	110	220	330	100	570	10,21	6,0	4,3	-1,7	0,40	0,10	0,06	0,00	0,56	0,60	2,0	3,2	2,6	17,7	51,7	5,0	188,0	142,0	55,0	2,25	1,80	
55	6,0	230	360	590	60	350	9,90	5,1	4,7	-0,4	0,20	0,00	0,02	0,00	0,22	0,10	2,5	2,8	2,6	7,8	31,3	5,0	66,0	120,0	75,0	0,94	0,67	
56	45,6	500	440	940	0	60	8,64	4,8	4,3	-0,5	0,20	0,00	0,02	0,00	0,22	0,30	1,9	2,4	2,2	9,1	57,7	2,0	18,0	24,0	15,0	1,28	0,91	
57	13,1	220	310	530	80	390	9,68	4,8	4,3	-0,5	0,40	0,10	0,03	0,00	0,53	0,20	2,1	2,8	2,3	18,7	27,4	4,0	128,0	114,0	50,0	1,91	1,49	
58	20,9	280	260	540	130	330	9,44	4,5	3,8	-0,7	0,10	0,10	0,02	0,00	0,22	1,20	1,8	3,2	3,0	6,8	84,5	4,0	151,0	113,0	26,0	2,27	1,98	
59	1,1	190	160	350	150	500	9,80	5,2	5,1	-0,1	0,50	0,50	0,08	0,00	1,08	0,10	2,4	3,6	2,5	30,2	8,5	4,0	128,0	153,0	107,0	1,42	0,98	
60	4,6	260	250	510	80	410	9,96	4,9	5,1	0,2	0,20	0,00	0,02	0,00	0,22	0,00	1,9	2,1	1,9	10,4	10,4	5,0	116,0	171,0	80,0	1,15	0,89	
61	42,8	30	670	700	100	200	8,91	5,8	4,8	-1,0	1,30	0,50	0,05	0,00	1,85	0,30	1,5	3,7	1,8	50,7	14,0	50,0	69,0	54,0	38,0	2,17	1,50	
62	19,5	20	540	560	200	240	9,36	5,5	4,5	-1,0	2,40	0,90	0,14	0,00	3,44	0,40	1,7	5,5	2,1	62,1	10,4	60,0	92,0	64,0	44,0	2,44	1,70	
63	0,0	100	100	200	140	660	10,38	5,3	5,5	0,2	0,00	0,00	0,02	0,00	0,02	0,10	3,2	3,3	3,3	0,6	83,3	9,0	120,0	208,0	94,0	0,98	0,76	
64	2,5	250	90	340	130	530	10,06	4,9	4,5	-0,4	0,10	0,00	0,03	0,00	0,13	0,20	2,1	2,4	2,3	5,3	60,6	7,0	159,0	202,0	55,0	1,34	1,14	
65	1,9	50	110	160	230	610	10,18	6,0	5,3	-0,7	2,80	0,80	0,19	0,00	3,79	0,10	3,8	7,7	3,9	49,3	2,6	12,0	178,0	160,0	153,0	1,84	1,17	
66	1,3	30	330	360	270	370	9,61	5,1	4,1	-1,0	0,10	0,20	0,12	0,00	0,42	3,70	0,7	4,8	4,4	8,7	89,8	4,0	143,0	104,0	33,0	2,34	1,94	
67	30,3	210	530	740	60	240	9,13	5,2	4,4	-0,8	0,10	0,00	0,07	0,00	0,17	0,70	1,0	1,9	1,7	9,1	80,5	2,0	90,0	76,0	25,0	2,01	1,66	
68	7,7	180	110	290	160	540	9,67	5,1	4,5	-0,6	0,80	0,50	0,08	0,00	1,38	0,70	1,6	3,7	2,3	37,5	33,7	6,0	213,0	152,0	69,0	2,38	1,85	
69	18,1	70	140	300	570	9,33	6,2	5,6	5,6	-0,6	2,50	0,50	0,50	27,00	30,00	0,20	0,6	30,8	0,8	97,4	0,7	3,0	305,0	204,0	70,0	2,54	2,08	
70	4,9	80	130	210	170	620	9,90	5,4	4,6	-0,8	1,30	0,40	0,08	0,00	1,78	0,60	2,2	4,6	2,8	38,9	25,2	7,0	236,0	207,0	114,0	1,94	1,43	
71	10,1	210	320	530	130	340	9,59	6,1	6,1	0,0	1,10	0,40	0,03	0,00	1,53	0,00	0,2	1,7	0,2	88,4	0,0	2,0	102,0	104,0	41,0	1,67	1,33	
72	17,7	160	410	570	120	310	9,58	4,8	4,3	-0,5	0,20	0,00	0,01	0,00	0,21	0,60	2,5	3,3	3,1	6,3	74,1	4,0	107,0	108,0	40,0	1,68	1,36	
73	0,9	20	50	70	230	700	9,99	5,4	5,0	-0,4	2,10	1,30	0,07	0,02	3,49	0,20	2,6	6,3	2,8	55,5	5,4	9,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	
74	0,0	20	80	100	260	640	9,90	5,2	4,9	-0,3	0,30	0,10	0,04	0,04	0,48	0,20	2,9	3,6	3,1	13,4	29,4	5,0	212,0	209,0	252,0	1,72	0,97	
75	11,0	160	90	250	150	600	9,83	5,8	5,2	-0,6	4,50	0,60	0,04	0,02	5,16	0,10	2,7	8,0	2,8	64,8	1,9	11,0	221,0	199,0	143,0	1,89	1,29	
76	0,0	90	100	190	200	610	10,31	5,6	6,2	0,6	0,40	0,20	0,03	0,02	0,65	0,00	1,3	2,0	1,3	33,3	0,0	0,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	
77	0,0	10	90	100	230	670	9,91	5,5	5,4	-0,1	0,40	0,90	0,09	0,02	1,41	0,10	1,9	3,4	2,0	41,3	6,6	5,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	
78	0,0	40	100	140	240	620	10,30	5,4	5,3	-0,1	0,10	0,00	0,05	0,02	0,17	0,00	2,4	2,6	2,4	6,6	0,0	8,0	102,0	234,0	258,0	0,74	0,43	
79	20,5	160	290	450	100	450	9,62	5,7	5,4	-0,3	1,30	0,80	0,01	0,01	2,12	0,00	1,0	3,1	1,0	67,9	0,0	4,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	
80	18,9	100	170	270	120	610	9,27	5,8	4,9	-0,9	5,30	4,00	0,06	0,06	9,42	0,10	1,1	10,6	1,2	88,7	1,1	1,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.	
81	0,0	310	290	600	70	330	10,03	5,1	5,1	0,0	0,10	0,00	0,10	0,02	0,22	0,00	2,2	2,4	2,2	9,1	0,0	8,0	62,0	96,0	73,0	1,10	0,74	
82	0,0	100	100	200	180	620	10,21	5,2	5,5	0,3	0,00	0,00	0,01	0,00	0,01	0,00	2,9	2,9	2,9	0,3	0,0	7,0	124,0	211,0	199,0	1,00	0,62	
83	8,6	300	180	480	30	490	9,55	5,0	4,5	-0,5	0,00	0,00	0,01	0,01	0,03	0,30	1,2	1,5	1,5	1,3	93,8	2,0	169,0	122,0	84,0	2,35	1,63	
84	38,1	10	660	670	100	230	8,68	5,2	4,4	-0,8	0,90	0,20	0,03	0,00	1,13	0,10	0,7	1,9	0,8	58,5	8,1	0,2	71,0	56,0	29,0	2,16	1,62	
85	30,4	210	540	750	70	180	8,95	4,6	4,2	-0,4	0,20	0,00	0,02	0,02	0,24	0,70	0,7	1,6	1,4	14,6	74,5	2,0	68,0	55,0	27,0	2,10	1,60	
86	29,3	30	550	580	140	280	9,95	5,0	4,2	-0,8	1,20	0,70	0,20	0,03	3,92	0,00	0,8	4,7	0,8	83,1	0,0	4,0	108,0	67,0	33,0	2,74	2,08	
87	0,0	10	30	40	240	720	9,95	6,0	4,2	-0,8	1,20	0,70	0,20	0,03	2,13	1,10	2,7	5,9	3,8	35,9	34,1	7,0	127,0	107,0	248,0	2,02	0,81	
88	2,5	20	70	90	240	670	9,82	6,2	5,6	-0,6	4,50	1,10	0,05	0,00	5,65	0,00	1,0	6,7	1,0	85,0	0,0	6,0	259,0	190,0	296,0	2,32	1,16	
89	3,4	30	60	90	180	730	10,0	6,4	5,8	-0,6	3,20	0,70	0,10	0,00	4,0	0,20	0,6	4,8	0,8	83,2	4,8	6,0	244,0	200,0	237,0	2,10	1,20	
90	0,0	10	50	60	260	680	10,16	4,7	4,4	-0,3	0,30	0,30	0,04	0,01	0,65	0,60	3,1	4,4	3,7	14,9	48,0	9,0	195,0	200,0	259,0	1,66	0,91	
91	37,7	280	540	820	60	120	9,03	4,6	4,1	-0,5	0,10	0,00	0,02	0,00	0,12	0,60	0,2	0,9	0,8	13,0	83,3	2,0	40,0	43,0	16,0	1,58	1,28	
92	38,3	1	650	651	100	230	9,29	6,6	5,5	-1,1	2,70	0,60	0,06	0,03	3,39	0,00	0,0	3,4	0,0	100,0	0,0	0,2	92,0	82,0	17,0	1,91	1,68	
93	27,6	270	430	700	90	210	9,35	4,4	3,9	-0,5	0,10	0,10	0,05	0,03	0,28	1,80	0,7	2,8	2,5	10,1	86,5	2,0	83,0	65,0	22,0	2,17	1,78	

Amostra	Prem	Área Grossa	Área Fina	Área Total	Silte	Argila	NaF	pH H ₂ O	KCl	ΔpH	Ca ²⁺	Mg ²⁺	K ⁺	Na ⁺	SB	Al ³⁺	H ⁺	T	H+Al	V	m	C	g kg ⁻¹			mol mol ⁻¹	
																							SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	Ki	Kr
94	32,5	270	470	740	70	190	9,08	4,4	3,7	-0,7	0,10	0,10	0,07	0,03	0,00	0,4	0,7	0,4	42,9	0,0	3,0	34,0	64,0	16,0	0,90	0,78	
95	42,2	270	370	640	230	130	8,37	6,7	5,5	-1,2	7,20	1,70	0,26	0,12	9,28	0,30	1,3	10,9	1,6	85,3	3,1	21,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
96	24,1	340	190	530	0	470	9,50	5,9	5,3	-0,6	0,90	0,40	0,08	0,02	1,40	0,10	0,8	2,3	0,9	60,9	6,7	2,0	37,0	94,0	44,0	0,67	0,51
97	10,4	150	200	350	100	550	9,83	6,4	5,6	-0,8	2,30	0,80	0,12	0,05	3,27	0,20	1,4	4,9	1,6	67,1	5,8	5,0	142,0	104,0	86,0	2,32	1,52
98	35,2	140	130	270	150	580	9,22	7,0	5,5	-1,5	5,70	2,00	0,06	0,16	7,92	0,00	1,3	9,2	1,3	85,9	0,0	8,0	141,0	146,0	34,0	1,64	1,43
99	6,1	50	150	200	170	630	9,99	6,0	5,1	-0,9	3,40	0,80	0,14	0,06	4,40	0,00	2,0	6,4	2,0	68,8	0,0	9,0	17,8	146,0	227,0	0,21	0,10
100	1,5	100	110	210	220	570	10,30	6,8	6,2	-0,6	2,40	1,00	0,08	0,02	3,47	0,00	0,2	3,7	0,2	94,6	0,0	3,0	132,0	151,0	212,0	1,49	0,78
101	28,0	250	290	540	90	370	9,49	5,4	4,3	-1,1	0,30	0,60	0,05	0,02	1,00	0,40	1,8	3,2	2,2	31,3	28,6	5,0	124,0	104,0	88,0	2,03	1,31
102	26,1	280	370	650	50	300	9,46	5,2	4,2	-1,0	2,90	1,00	0,05	0,02	3,97	0,60	1,3	5,9	1,9	67,6	13,1	3,0	84,0	84,0	76,0	1,70	1,08
103	11,0	180	140	320	160	520	9,64	5,8	5,0	-0,8	2,10	0,70	0,22	0,05	3,07	0,00	1,8	4,9	1,8	63,0	0,0	7,0	173,0	101,0	134,0	2,91	1,57
104	15,3	310	320	630	70	300	9,92	5,6	4,6	-1,0	0,50	0,20	0,05	0,03	0,78	0,10	1,4	2,3	1,5	34,2	11,4	3,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
105	47,3	170	570	740	170	90	8,32	6,2	5,3	-0,9	2,30	0,70	0,10	0,04	3,14	0,00	1,2	4,3	1,2	72,4	0,0	9,0	33,0	24,0	3,0	2,34	2,16
106	31,1	220	370	590	120	290	9,49	5,0	3,9	-1,1	2,20	0,50	0,19	0,04	2,93	0,40	1,6	4,9	2,0	59,4	12,0	3,0	111,0	122,0	22,0	1,55	1,39
107	36,8	360	370	730	60	210	9,37	5,8	4,3	-1,5	1,00	0,20	0,03	0,00	1,23	0,30	0,3	1,8	0,6	67,2	19,6	5,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
108	31,8	310	460	770	50	180	9,39	5,2	4,2	-1,0	0,10	0,10	0,02	0,00	0,22	1,10	1,1	2,4	2,2	9,1	83,3	4,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
109	5,4	160	310	470	80	450	9,85	5,7	4,2	-1,5	1,20	0,20	0,09	0,00	1,49	1,80	1,9	5,2	3,7	28,7	54,7	4,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
110	22,5	250	410	660	70	270	9,59	5,4	4,0	-1,4	1,00	0,10	0,02	0,00	1,12	1,80	1,6	4,5	3,4	24,8	61,6	5,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
111	30,3	180	230	410	60	530	9,38	6,1	4,9	-1,2	1,40	0,80	0,27	0,00	2,47	0,10	2,0	4,6	2,1	54,0	3,9	7,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
112	16,4	120	240	360	120	520	9,66	5,2	4,3	-0,9	0,60	0,50	0,12	0,00	1,22	1,20	2,4	4,8	3,6	25,3	49,6	8,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
113	31,2	210	450	660	70	270	9,51	5,9	4,5	-1,4	1,20	0,00	0,05	0,00	1,25	0,20	1,3	2,8	1,5	45,5	13,8	4,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
114	29,0	350	470	820	50	130	9,48	4,8	3,9	-0,9	0,10	0,10	0,10	0,40	0,70	1,20	1,8	3,7	3,0	18,9	63,2	3,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
115	25,0	390	320	710	70	220	9,53	4,7	3,9	-0,8	0,00	0,00	0,09	0,03	0,12	1,60	1,7	3,4	3,3	3,5	93,0	1,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
116	26,1	250	420	670	100	230	9,54	5,2	4,2	-1,0	0,50	0,10	0,03	0,01	0,64	2,10	0,9	3,6	3,0	17,6	76,6	2,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.
117	25,0	580	270	850	40	110	9,42	5,4	4,5	-0,9	0,30	0,20	0,11	0,00	0,61	0,20	1,3	2,1	1,5	28,9	24,7	6,0	nd.	nd.	nd.	nd.	nd.

ANEXO C – ÁRVORE DE TESTES

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN01	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00614667	0,7756
RN02	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	TANSIG	TRAINLM	25	0,00614667	0,7756
RN03	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	TANSIG	TRAINLM	50	0,00614667	0,7756
RN04	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	TANSIG	TRAINLM	100	0,00614667	0,7756
RN05	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	TANSIG	TRAINLM	200	0,00614667	0,7756
RN06	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	TANSIG	TRAINLM	5	0,00774427	0,7720
RN07	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00617061	0,7654
RN08	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00612352	0,7689
RN09	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00611842	0,7693
RN10	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00611581	0,7697
RN11	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00611470	0,7698
RN12	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	400	0,00611439	0,7699
RN13	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	600	0,00611431	0,7699
RN14	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	1000	0,00611421	0,7699
RN15	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	400	0,00435355	0,6621
RN16	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00409326	0,7873
RN17	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00584925	0,7756
RN18	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00435353	0,6621
RN19	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00178204	0,5028
RN20	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00013930	0,1621
RN21	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00435396	0,6623
RN22	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00435645	0,6636
RN23	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00273127	0,6445
RN24	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00611594	0,7698
RN25	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00247654	0,5947
RN26	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00424328	0,8125
RN27	At, Af, Arg., pH NaF, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00548404	0,6862
RN28	At, Af, Arg., Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,01980110	0,2379
RN29	At, Af, pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00442716	0,6567
RN30	At, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00524376	0,6928
RN31	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00327282	0,6629
RN32	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00710935	0,8370
RN33	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00396544	0,7374
RN34	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00710359	0,8369
RN35	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	400	0,00710098	0,8369
RN36	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00712604	0,8373
RN37	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	40	0,00712712	0,8372
RN38	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00712900	0,8373
RN39	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	TANSIG	TRAINLM	50	0,00719085	0,8354
RN40	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00712224	0,8372
RN41	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG/PURELIN	TRAINLM	50	0,00710793	0,8348
RN42	At, Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,04111990	0,5178
RN43	At, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00754525	0,8133
RN44	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00766228	0,8205
RN45	At, Af, Arg., Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,04113160	0,5177
RN46	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00766444	0,8206
RN47	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00771112	0,8214
RN48	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00764752	0,8202
RN49	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00764411	0,8201
RN50	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00777332	0,8170
RN51	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG/PURELIN	TRAINLM	10	0,00767793	0,8167
RN52	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00775326	0,8220
RN53	Af, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00877984	0,8109
RN54	Af, Arg., Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,04208600	0,5281
RN55	Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00780931	0,8250
RN56	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00849152	0,7927
RN57	Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00772241	0,8242
RN58	Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00771011	0,8241
RN59	Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	1000	0,00770327	0,8240
RN60	Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00781798	0,8251
RN61	Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00699955	0,8060
RN62	Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00570221	0,7622
RN63	Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00790518	0,8226
RN64	Af, pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 2 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00731221	0,8072
RN65	Af, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00875781	0,8120
RN66	Af, Al ₂ O ₃	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,04481300	0,4162
RN67	pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,01010250	0,7956
RN81	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00570151	0,7690
RN82	At, Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00712415	0,8372

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN83	Af, Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00765669	0,8204
RN84	Af, pH NaF, ΔpH	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00814055	0,8089
RN85	Af, pH NaF, ΔpH	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00789291	0,8093
RN86	Af, pH NaF, ΔpH	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00787219	0,8092
RN87	Af, pH NaF, ΔpH	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00759356	0,7989
RN88	Af, pH NaF, ΔpH	[0,1]	[3 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00699990	0,7608
RN89	Af, pH NaF, ΔpH	[0,1]	[3 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00788711	0,8110
RN90	Af, pH NaF, ΔpH	[0,1]	[3 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00788711	0,8111
RN91	Af, pH NaF, ΔpH	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00796243	0,8095
RN92	Af, pH NaF, pH KCl	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00853410	0,8015
RN93	Af, pH NaF, pH KCl	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00847984	0,8009
RN94	Af, pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00847844	0,7970
RN95	Af, pH NaF, C	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00845083	0,8138
RN96	Af, pH NaF, Si.	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00807462	0,8280
RN97	Af, pH NaF, Kr	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00793571	0,8094
RN98	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00803985	0,8315
RN99	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00792394	0,8292
RN100	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00803017	0,8304
RN101	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00620449	0,7776
RN102	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINSCG	100	0,00981525	0,7772
RN103	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINSCG	50	0,00856494	0,8358
RN104	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINSCG	25	0,00853628	0,8313
RN105	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINSCG	50	0,00987700	0,7825
RN106	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINRP	100	0,00874621	0,8265
RN107	Af, pH NaF, C, Si.	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINRP	50	0,00905083	0,8364
RN108	Af, pH NaF, C, Si., Kr	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00964229	0,7767
RN109	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00385847	0,7514
RN110	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00386801	0,7510
RN111	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00391165	0,7497
RN112	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00395887	0,7466
RN113	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00385482	0,7515
RN114	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	400	0,00385208	0,7517
RN115	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	1000	0,00385100	0,7518
RN116	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00245620	0,6414
RN117	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00019871	0,7243
RN118	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00001990	0,4258
RN119	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00110310	0,6655
RN120	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00015081	0,3483
RN121	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00029786	0,3222
RN122	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 4 1]	TANSIG	TRAINLM	100	0,00062696	0,7100
RN123	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 4 1]	LOGSIG/PURELIN	TRAINLM	100	0,00031108	0,6066
RN124	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[9 4 1]	TANSIG/PURELIN	TRAINLM	100	0,00062558	0,6586
RN125	Af, pH NaF, Kr	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00792212	0,8095
RN126	Af, pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00848124	0,7986
RN127	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00472574	0,8054
RN128	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00436097	0,7554
RN129	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00394010	0,7543
RN130	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00482288	0,7146
RN131	Af, At, Kr, Arg., ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,03315720	0,4402

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN132	Af, At, Kr, pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00387489	0,7587
RN133	Af, At, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00391403	0,7499
RN134	Af, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00398468	0,7741
RN135	At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00418300	0,7415
RN136	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00471219	0,8054
RN137	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00474758	0,8055
RN138	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00478053	0,8058
RN139	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00484815	0,8060
RN140	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[8 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00387772	0,7215
RN141	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00169985	0,4491
RN142	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[7 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00593020	0,8084
RN143	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃	[0,1]	[7 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00498994	0,8049
RN144	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[7 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00616398	0,8058
RN145	Af, At, Kr, Arg., ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[7 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,03581270	0,5277
RN146	Af, At, Kr, pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[7 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00474445	0,8046
RN147	Af, At, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[7 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00475131	0,8054
RN148	Af, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[7 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00489321	0,7919
RN149	At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[7 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00485393	0,7963
RN150	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00639444	0,8160
RN151	Af, At, Kr, Arg., pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00750238	0,8178
RN152	Af, At, Kr, Arg., ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,03641230	0,5587
RN153	Af, At, Kr, pH NaF, ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00594057	0,8123
RN154	Af, At, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00710506	0,8210
RN155	Af, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00610964	0,7963
RN156	At, Kr, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00621691	0,7937
RN157	Af, At, Arg., pH NaF, ΔpH	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00716711	0,8296
RN158	Af, At, Arg., pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00811159	0,8173
RN159	Af, At, Arg., ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,03712110	0,5772
RN160	Af, At, pH NaF, ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00723205	0,8013
RN161	Af Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00746830	0,7930
RN162	At, Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00714826	0,8145
RN163	Af, At, Arg., pH NaF	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00815644	0,8248
RN164	Af, At, Arg., ΔpH	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,03930880	0,5013
RN165	Af, At, pH NaF, ΔpH	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00732815	0,8091
RN166	Af, Arg., pH NaF, ΔpH	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00783286	0,8016
RN167	At, Arg., pH NaF, ΔpH	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00722651	0,8222
RN168	Af, At, Arg.	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,04154330	0,5167
RN169	Af, At, pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00836966	0,8083
RN170	Af, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00868137	0,8093
RN171	At, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00837975	0,8093
RN172	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00847729	0,8020
RN173	Arg., pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00857458	0,8019
RN174	Arg., pH NaF	[0,1]	[2 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00915451	0,7887
RN175	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00927428	0,7896
RN176	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00922911	0,7896
RN177	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00915268	0,7887
RN178	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00913887	0,7884
RN179	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	200	0,00913511	0,7883
RN180	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	400	0,00913284	0,7882
RN181	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	600	0,00913218	0,7882
RN182	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00924905	0,7906
RN183	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00917307	0,7890
RN184	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINSCG	500	0,00916755	0,7889
RN185	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINSCG	100	0,00924088	0,7907
RN186	At, pH NaF	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINSCG	50	0,00960929	0,7914
RN187	At, pH NaF	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00822108	0,7489
RN188	At, pH NaF	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00704315	0,6802

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN189	Af, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00875951	0,8107
RN190	Af, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00868549	0,8093
RN191	Af, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	50	0,00868256	0,8092
RN192	Af, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00867047	0,8089
RN193	Af, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	400	0,00866180	0,8087
RN194	Af, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00878870	0,8112
RN195	Af, Arg., pH NaF	[0,1]	[3 2 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00892335	0,8096
RN196	Af, Arg., pH NaF, T	[0,1]	[3 2 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00929014	0,8063
RN197	Af, Arg., pH NaF, T	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	50	0,00858922	0,8076
RN198	Af, Arg., pH NaF, T	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	100	0,00857206	0,8070
RN199	Af, Arg., pH NaF, V	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00863188	0,7996
RN200	Af, Arg., pH NaF, C	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00845862	0,8143
RN201	Af, Arg., pH NaF, H	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00703768	0,7899
RN202	Af, Arg., pH NaF, Si	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00809401	0,8308
RN203	Af, Arg., pH NaF, H+Al	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00734977	0,7618
RN204	Af, Arg., pH NaF, H+Al	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00923008	0,7790
RN205	Af, Arg., pH NaF, pH H ₂ O	[0,1]	[4 1 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00875979	0,8114
RN206	Af, Arg., pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00949019	0,7974
RN207	Af, Arg., pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00908789	0,7983
RN208	Af, Arg., pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00850855	0,7994
RN209	Af, Arg., pH NaF, Mg ²⁺	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00863185	0,8220
RN210	Af, Arg., pH NaF, SB	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00873902	0,8069
RN211	Af, Arg., pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00982093	0,8178
RN212	Af, Arg., pH NaF, m	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	34	0,00861963	0,7924
RN213	Af, Arg., pH NaF, Ki	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00693313	0,8172
RN214	Af, Arg., pH NaF, pH KCl	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00886069	0,8124
RN215	Af, Arg., pH NaF, K	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,01293160	0,8068
RN216	Todos	[0,1]	[26 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00289024	0,7936
RN217	Todos	[0,1]	[26 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00172464	0,7645
RN218	pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	65	0,00335255	0,7971
RN219	pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	40	0,00392393	0,7951
RN220	pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00395804	0,8291
RN221	pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00360592	0,8017
RN222	Af, pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[9 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00245672	0,8316
RN223	Af, pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[9 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00381126	0,8504
RN224	Af, pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[9 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00391573	0,8020
RN225	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[9 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00383957	0,8409
RN226	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[9 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00379728	0,8562
RN227	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[9 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00431842	0,7958
RN228	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00383286	0,8878
RN229	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, H ⁺	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	33	0,00238213	0,8087
RN230	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , V, H ⁺	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00378354	0,8021
RN231	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00393980	0,7866
RN232	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00382455	0,7889
RN233	Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00340415	0,7563
RN234	Arg., pH NaF, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00249376	0,7179
RN235	Arg., ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,02678940	0,3533
RN236	pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00397321	0,8657
RN237	pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V, H ⁺	[0,1]	[8 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	36	0,00220043	0,8044
RN238	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[8 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	30	0,00284627	0,8358
RN239	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂	[0,1]	[8 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00458305	0,8619

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN240	Kr, V Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[8 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00463896	0,8673
RN210	Af, Arg., pH NaF, SB	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00873902	0,8069
RN211	Af, Arg., pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00982093	0,8178
RN212	Af, Arg., pH NaF, m	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	34	0,00861963	0,7924
RN213	Af, Arg., pH NaF, Ki	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00693313	0,8172
RN214	Af, Arg., pH NaF, pH KCl	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00886069	0,8124
RN215	Af, Arg., pH NaF, K ⁺	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,01293160	0,8068
RN216	Todos	[0,1]	[26 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00289024	0,7936
RN217	Todos	[0,1]	[26 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00172464	0,7645
RN241	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[8 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00329474	0,8034
RN242	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr	[0,1]	[7 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00422300	0,8525
RN243	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , V	[0,1]	[7 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00426775	0,8149
RN244	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[7 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00483144	0,8192
RN245	Arg., pH NaF, ΔpH, Si., SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[7 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00454040	0,8141
RN246	Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[7 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00397272	0,8551
RN247	Arg., pH NaF, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[7 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00416970	0,8027
RN248	Arg., ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[7 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,02458520	0,4999
RN249	pH NaF, ΔpH, Si., Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[7 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	36	0,00424023	0,8382
RN250	Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00576627	0,7924
RN251	Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , V	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00499136	0,7924
RN252	Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	37	0,00425846	0,7880
RN253	Arg., pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00603776	0,7809
RN254	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00560404	0,8069
RN255	pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00751593	0,7922
RN256	Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[7 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	33	0,00349969	0,8292
RN257	Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[7 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00540352	0,7988
RN258	Arg., pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[7 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	37	0,00278363	0,8206
RN259	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	49	0,00541065	0,7929
RN260	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00685465	0,7954
RN261	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00432157	0,7993
RN262	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00396518	0,8264
RN263	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00396518	0,7488
RN264	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	50	0,00837618	0,8405
RN265	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[6 5 1]	LOGSIG	TRAINSCG	28	0,00622071	0,8098
RN266	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , Kr	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00780081	0,7413
RN267	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , V	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	30	0,00332494	0,7958
RN268	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00745890	0,8190
RN269	Arg., pH NaF, SiO ₂ , Kr, V	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00408784	0,7881
RN270	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00774701	0,7724
RN271	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00780087	0,8036
RN272	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00683529	0,8116
RN273	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00464394	0,7994
RN274	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00711207	0,8006
RN275	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00454512	0,8197
RN276	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	34	0,00701138	0,8220
RN277	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	12	0,02370180	0,6789
RN278	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00292691	0,7966
RN279	Arg., pH NaF, Al ₂ O ₃ , Kr, V	[0,1]	[5 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00679961	0,7884
RN280	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00764117	0,8098
RN281	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00544585	0,7237
RN282	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00615880	0,7438
RN283	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00847449	0,8145
RN284	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00849097	0,7993
RN285	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINRP	36	0,01308420	0,7926
RN286	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINRP	81	0,00958807	0,7532
RN287	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	51	0,00822246	0,8259
RN288	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 6 1]	LOGSIG	TRAINRP	26	0,00878873	0,8450
RN289	Arg., pH NaF, Kr, V	[0,1]	[4 7 1]	LOGSIG	TRAINRP	38	0,00860747	0,8331
RN290	Arg., pH NaF, Kr	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	58	0,00845404	0,7886
RN291	Arg., pH NaF, Kr	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00738085	0,7748
RN292	Arg., pH NaF, Kr	[0,1]	[3 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00880769	0,7456
RN293	Arg., pH NaF, Kr	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	53	0,01005570	0,7743

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN294	Arg., pH NaF, Kr	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	25	0,01249880	0,8061
RN295	Arg., pH NaF, V	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00803800	0,7906
RN296	Arg., pH NaF, V	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	35	0,01078430	0,7786
RN297	pH NaF, Kr, V	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00963282	0,8067
RN298	pH NaF, Kr, V	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	31	0,00857751	0,8470
RN299	pH NaF, Kr, V, H+Al	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00777039	0,7734
RN300	pH NaF, Kr, V, H+Al	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	27	0,01400360	0,7713
RN301	pH NaF, Kr, V, T	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINRP	15	0,00878290	0,8114
RN302	pH NaF, Kr, V, T	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00844452	0,8267
RN303	pH NaF, Kr, V, T	[0,1]	[4 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00774613	0,8276
RN304	pH NaF, Kr, V, T	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00676458	0,8062
RN305	pH NaF, Kr, V, T	[0,1]	[4 4 1]	LOGSIG	TRAINRP	45	0,00994342	0,8293
RN306	pH NaF, Kr, V, T	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	61	0,00738729	0,8165
RN307	pH NaF, Kr, V, T	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINRP	18	0,02770140	0,4164
RN308	pH NaF, Kr, V, C	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	32	0,00923249	0,7913
RN309	pH NaF, Kr, V, C	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00863252	0,6659
RN310	pH NaF, Kr	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	48	0,00834467	0,8009
RN311	pH NaF, Kr	[0,1]	[2 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00948173	0,7996
RN312	pH NaF, Kr	[0,1]	[2 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00932839	0,8050
RN313	pH NaF, Kr	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00955320	0,7947
RN314	pH NaF, Kr	[0,1]	[2 2 1]	LOGSIG	TRAINRP	79	0,01158160	0,7912
RN315	pH NaF, Kr	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINRP	86	0,00939845	0,8008
RN316	pH NaF, Kr	[0,1]	[2 4 1]	LOGSIG	TRAINRP	20	0,01044850	0,8172
RN317	pH NaF, Kr	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	19	0,00992646	0,8467
RN318	pH NaF	[0,1]	[1 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,01583350	0,8014
RN319	pH NaF	[0,1]	[1 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	59	0,00958286	0,7789
RN320	pH NaF	[0,1]	[1 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,01418980	0,7933
RN321	pH NaF	[0,1]	[1 3 1]	LOGSIG	TRAINRP	20	0,01059800	0,7421
RN322	pH NaF	[0,1]	[1 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	24	0,01175920	0,8059
RN323	pH NaF	[0,1]	[1 7 1]	LOGSIG	TRAINRP	26	0,01027220	0,7262
RN324	Kr	[0,1]	[1 3 1]	LOGSIG	TRAINRP	21	0,06951540	0,1375
RN325	pH NaF, Kr, Af	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00741741	0,8102
RN326	pH NaF, Kr, Af	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00635309	0,7906
RN327	pH NaF, Kr, Af	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	37	0,00837170	0,8137
RN328	pH NaF, Kr, Si.	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00857332	0,8820
RN329	pH NaF, Kr, Si.	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	46	0,00833115	0,8069
RN330	pH NaF, Kr, Si.	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00875262	0,8104
RN331	pH NaF, Kr, Si.	[0,1]	[3 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00925909	0,8314
RN332	pH NaF, Kr, Si.	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINRP	48	0,01164060	0,8114
RN333	pH NaF, Kr, Si.	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	40	0,00901899	0,8160
RN334	pH NaF, Kr, Si.	[0,1]	[3 7 1]	LOGSIG	TRAINRP	16	0,01033060	0,7961
RN335	pH NaF, Kr, Si.	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINRP	33	0,01475810	0,7587
RN336	pH NaF, Kr, Arg.	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00804160	0,7855
RN337	pH NaF, Kr, Arg.	[0,1]	[3 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00891450	0,8200
RN338	pH NaF, Kr, Arg.	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00919078	0,7558
RN339	pH NaF, Kr, Arg.	[0,1]	[3 4 1]	LOGSIG	TRAINRP	25	0,01056670	0,7572
RN340	pH NaF, Ki	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00770922	0,8045
RN341	pH NaF, Ki	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	18	0,00935325	0,7654
RN342	pH NaF, Si.	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00857909	0,8188
RN343	pH NaF, Si.	[0,1]	[2 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00760570	0,8378
RN344	pH NaF, Si.	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00750781	0,8549
RN345	pH NaF, Si.	[0,1]	[2 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00683145	0,8511
RN346	pH NaF, Si.	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	59	0,00802969	0,8196
RN347	pH NaF, Si.	[0,1]	[2 8 1]	LOGSIG	TRAINRP	51	0,00779737	0,7923
RN348	pH NaF, Si.	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINRP	31	0,01132510	0,8175
RN349	pH NaF, Si.	[0,1]	[2 2 1]	LOGSIG	TRAINRP	46	0,01091900	0,7866
RN350	pH NaF, Af	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINRP	33	0,00810879	0,7843
RN351	pH NaF, Af	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINRP	17	0,00682298	0,7645
RN352	pH NaF, Af	[0,1]	[2 2 1]	LOGSIG	TRAINRP	28	0,00764245	0,7989
RN353	pH NaF, Af	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINRP	38	0,00788283	0,7786
RN354	pH NaF, Arg.	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	34	0,00822793	0,7945
RN355	pH NaF, Arg.	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	7	0,00022614	0,4821
RN356	pH NaF, Arg.	[0,1]	[2 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00995271	0,8009
RN357	pH NaF, Arg.	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINRP	21	0,01452760	0,7727
RN358	pH NaF, V	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,01119290	0,8105
RN359	pH NaF, V	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00806178	0,7999
RN360	pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00468106	0,7542
RN361	pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	41	0,00357473	0,7529
RN362	pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[6 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00420322	0,7521
RN363	pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00413726	0,7766
RN364	pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[6 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00342934	0,7197
RN365	pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[6 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00405163	0,7084

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN366	pH NaF, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00358579	0,6830
RN367	pH NaF, DpH, ΔpH, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINRP	23	0,01815540	0,4893
RN368	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	9	0,08996540	0,1555
RN369	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[5 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00499264	0,6863
RN370	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00503448	0,7328
RN371	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00408181	0,6588
RN372	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00431263	0,6999
RN373	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00610000	0,6631
RN374	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINRP	33	0,00239260	0,7618
RN375	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00640734	0,7954
RN376	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00609188	0,7551
RN377	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	33	0,00486245	0,7136
RN378	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00682924	0,6259
RN379	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00595537	0,7167
RN380	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINRP	10	0,15116800	0,2265
RN381	pH NaF, Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	185	0,00653547	0,7470
RN382	pH NaF, Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	38	0,00609808	0,7605
RN383	pH NaF, Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	42	0,00641100	0,7532
RN384	pH NaF, Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00566239	0,7370
RN385	pH NaF, Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00704223	0,7408
RN386	pH NaF, Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	34	0,00250856	0,7765
RN387	pH NaF, Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00608464	0,7653
RN388	pH NaF, Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINRP	41	0,00748552	0,6849
RN389	pH NaF, Fe ₂ O ₃ , Kr	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINRP	73	0,00944331	0,6718
RN390	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	9	0,09000050	0,2525
RN391	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00835198	0,7881
RN392	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00849428	0,7745
RN393	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00736347	0,7827
RN394	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00798994	0,7546
RN395	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00713088	0,7582
RN396	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	8	0,00916191	0,7117
RN397	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINRP	26	0,01026380	0,6593
RN398	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00554720	0,6710
RN399	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00601694	0,6953
RN400	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00482595	0,6670
RN401	pH NaF, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00512639	0,7534
RN402	pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00634982	0,7360
RN403	pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	41	0,00493237	0,7500
RN404	pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	59	0,00482117	0,7439
RN405	pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	32	0,00329416	0,6479
RN406	pH NaF, ΔpH, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00485374	0,7009
RN407	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00692765	0,7810
RN408	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00698961	0,8116
RN409	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00749720	0,6944
RN410	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00727645	0,7870
RN411	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00764792	0,6580
RN412	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00711664	0,7417
RN413	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00715434	0,5979
RN414	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H ⁺	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00672735	0,6661
RN415	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H ⁺	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00699534	0,6708
RN416	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H ⁺	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00762256	0,7453
RN417	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H ⁺	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00609032	0,7715
RN418	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H ⁺	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00649396	0,7421
RN419	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H ⁺	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00512187	0,6753
RN420	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H ⁺	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00596892	0,7873
RN421	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00717302	0,7965
RN422	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00867405	0,7504
RN423	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00739743	0,7199
RN424	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	36	0,00414890	0,7551
RN425	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00661795	0,7329
RN426	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00218107	0,7423
RN427	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00797265	0,7200
RN428	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V, H ⁺	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00630225	0,7753
RN429	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V, H ⁺	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00548870	0,7164
RN430	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V, H ⁺	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00563346	0,7144
RN431	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V, H ⁺	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00435276	0,7446
RN432	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V, H ⁺	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00570971	0,7284
RN433	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V, H ⁺	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00516129	0,8034
RN434	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , V, H ⁺	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00517812	0,6782
RN435	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H + Al, V	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,0068219	0,7191
RN436	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H + Al, V	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00761691	0,7155

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN437	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H + Al, V	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00631664	0,7515
RN438	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H + Al, V	[0,1]	[6 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00566078	0,7496
RN439	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H + Al, V	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00669023	0,6782
RN440	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H + Al, V	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00528743	0,7912
RN441	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H + Al, V	[0,1]	[6 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00509617	0,7925
RN442	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , H + Al, V	[0,1]	[6 18 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00588696	0,4929
RN443	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00738853	0,7686
RN444	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00744503	0,7596
RN445	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00874475	0,7449
RN446	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00788765	0,6352
RN447	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00879654	0,6506
RN448	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00670155	0,6829
RN449	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00706288	0,6856
RN450	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	100	0,00701743	0,7356
RN451	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	60	0,00697642	0,7351
RN452	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00514667	0,7774
RN453	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00513982	0,7073
RN454	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00841659	0,7976
RN455	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00553580	0,8289
RN456	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00586267	0,7229
RN457	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,07492670	0,7315
RN458	pH NaF, SiO ₂ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00917057	0,6252
RN459	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00700682	0,7072
RN460	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00694002	0,7785
RN461	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00745436	0,7024
RN462	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00868270	0,6893
RN463	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00856871	0,7725
RN464	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00755546	0,7570
RN465	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , C	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00805200	0,7640
RN466	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00706582	0,7476
RN467	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00580505	0,7608
RN468	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00730502	0,7508
RN469	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00631587	0,8002
RN470	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00583929	0,6939
RN471	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00427758	0,7371
RN472	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00609074	0,7025
RN473	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T, C	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00700324	0,7296
RN474	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T, C	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00700815	0,7059
RN475	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T, C	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00723537	0,6473
RN476	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T, C	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00701020	0,6872
RN477	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T, C	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00589893	0,7354
RN478	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T, C	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00751340	0,7082
RN479	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , T, C	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00503734	0,7466
RN480	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00695843	0,7086
RN481	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	41	0,00663002	0,7151
RN482	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00760209	0,8069
RN483	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00948773	0,7169
RN484	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00671660	0,7599
RN485	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00782021	0,7559
RN486	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00744104	0,7103
RN487	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00691241	0,6964
RN488	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,0072828	0,7694
RN489	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00755467	0,6771
RN490	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00924069	0,7138
RN491	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00538848	0,7889
RN492	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00402259	0,7588
RN493	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00631100	0,8135
RN494	pH NaF, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SB	[0,1]	[4 18 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00599850	0,7279
RN495	pH NaF, Ca ²⁺ , Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00847107	0,7670
RN496	pH NaF, Ca ²⁺ , Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00826248	0,7490
RN497	pH NaF, Ca ²⁺ , Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00788829	0,7445
RN498	pH NaF, Ca ²⁺ , Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00815194	0,7593
RN499	pH NaF, Ca ²⁺ , Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00591510	0,8082
RN500	pH NaF, Ca ²⁺ , Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00635293	0,8041
RN501	pH NaF, Ca ²⁺ , Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00547743	0,7262
RN502	pH NaF, Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00811576	0,8479
RN503	pH NaF, Ca ²⁺ , Kr, H+Al	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00512997	0,7939
RN504	pH NaF, Ca ²⁺ , K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00795182	0,7841
RN505	pH NaF, Ca ²⁺ , Kr, K ⁺	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00736362	0,7845
RN506	pH NaF, Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00824896	0,8126
RN507	pH NaF, Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00830750	0,7960
RN508	pH NaF, Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00766355	0,8053

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN509	pH NaF, Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00627296	0,8396
RN510	pH NaF, Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00844387	0,8476
RN511	pH NaF, Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00808960	0,8420
RN512	pH NaF, Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00604667	0,8562
RN513	pH NaF, Kr, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[4 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00536826	0,8440
RN514	pH NaF, Kr, K ⁺	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00878344	0,7993
RN515	pH NaF, Kr, K ⁺	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00901780	0,8021
RN516	pH NaF, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00851098	0,7198
RN517	pH NaF, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00854147	0,8342
RN518	pH NaF, Kr, H+Al	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00732116	0,8277
RN519	pH NaF, Kr, H+Al	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00898010	0,8219
RN520	pH NaF, Kr, H+Al	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00836585	0,8275
RN521	pH NaF, Kr, H+Al	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00832157	0,8273
RN522	pH NaF, Kr, H+Al	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00820421	0,7191
RN523	pH NaF, Kr, H+Al	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00614657	0,8305
RN524	pH NaF, Kr, H+Al	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00691274	0,8376
RN525	pH NaF, H+Al	[0,1]	[2 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00954362	0,8279
RN526	pH NaF, H+Al	[0,1]	[2 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,01379780	0,8468
RN527	pH NaF, H+Al	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00972424	0,8336
RN528	pH NaF, H+Al	[0,1]	[2 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00623488	0,8006
RN529	pH NaF, H+Al	[0,1]	[2 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00808798	0,6740
RN530	pH NaF, Kr, H+Al, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00664985	0,7107
RN531	pH NaF, Kr, H+Al, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00689408	0,7206
RN532	pH NaF, Kr, H+Al, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00867264	0,8024
RN533	pH NaF, Kr, H+Al, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00404849	0,7214
RN534	pH NaF, Kr, H+Al, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00679985	0,7078
RN535	pH NaF, Kr, H+Al, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00648646	0,7590
RN536	pH NaF, Kr, H+Al, Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00800711	0,8075
RN537	pH NaF, H+Al, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00693354	0,6787
RN538	pH NaF, H+Al, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00702046	0,7760
RN539	pH NaF, H+Al, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00746926	0,7681
RN540	pH NaF, H+Al, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00572781	0,7390
RN541	pH NaF, H+Al, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00870662	0,7525
RN542	pH NaF, H+Al, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00938533	0,8210
RN543	pH NaF, H+Al, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00938121	0,8308
RN544	pH NaF, H+Al, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00745774	0,7885
RN545	pH NaF, H+Al, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00955335	0,8068
RN546	pH NaF, H+Al, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00621366	0,8620
RN547	pH NaF, H+Al, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00821849	0,7866
RN548	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00918973	0,8035
RN549	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00974115	0,8219
RN550	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00720681	0,8644
RN551	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00532801	0,8396
RN552	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00493682	0,8206
RN553	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00516982	0,8693
RN554	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00505751	0,8412
RN555	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00614486	0,7937
RN556	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00537626	0,8509
RN557	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	36	0,00700521	0,8076
RN558	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00840517	0,8244
RN559	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00899634	0,8409
RN560	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00638538	0,8012
RN561	pH NaF, SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00937207	0,8301
RN562	pH NaF, SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00486173	0,8610
RN563	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00634217	0,8389
RN564	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00520934	0,8482
RN565	pH NaF, SB, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00976002	0,7919
RN566	pH NaF, SB, Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00848951	0,7324
RN567	pH NaF, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00696008	0,8533
RN568	pH NaF, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00683154	0,8199
RN569	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00840482	0,8040
RN570	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00742107	0,8245
RN571	pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[2 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,01212210	0,7977
RN572	pH NaF, Al ₂ O ₃	[0,1]	[2 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,01077020	0,7718
RN573	pH NaF, K ⁺ , V, H+Al	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00882260	0,8266
RN574	pH NaF, K ⁺ , V, H+Al	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,01303100	0,8247
RN575	pH NaF, K ⁺ , V, H+Al	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00901793	0,8331
RN576	pH NaF, K ⁺ , V, H+Al	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00468539	0,8323
RN577	pH NaF, K ⁺ , V, H+Al	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00929074	0,8103
RN578	pH NaF, K ⁺ , V, H+Al	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00802245	0,6598
RN579	pH NaF, K ⁺ , V, H+Al	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00824482	0,6273
RN580	pH NaF, K ⁺ , V	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00847696	0,7936

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN581	pH NaF, K ⁺ , V	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00745031	0,8228
RN582	pH NaF, K ⁺ , V	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00732122	0,7831
RN583	pH NaF, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00758740	0,8336
RN584	pH NaF, K ⁺ , H+Al	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00911886	0,8201
RN585	pH NaF, V, H+Al	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00922906	0,8430
RN586	pH NaF, V, H+Al	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00614614	0,8067
RN587	pH NaF, V, H+Al	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	53	0,00884118	0,7314
RN588	pH NaF, V, H+Al	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00923099	0,8252
RN589	pH NaF, V, H+Al	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00469854	0,7539
RN590	pH NaF, V, H+Al	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00459094	0,8062
RN591	pH NaF, V, H+Al	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00448138	0,8078
RN592	pH NaF, V, H+Al	[0,1]	[3 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00818211	0,7567
RN593	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00715965	0,7432
RN594	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00516043	0,7993
RN595	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00782181	0,7946
RN596	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00508053	0,7367
RN597	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00523923	0,7550
RN598	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00405970	0,7824
RN599	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00595817	0,7184
RN600	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00786407	0,7625
RN601	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00821152	0,8051
RN602	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , H ⁺	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00836193	0,8022
RN603	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , m	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00540314	0,8005
RN604	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , m	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	52	0,00899577	0,7984
RN605	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , m	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00790021	0,7829
RN606	pH NaF, Mg ²⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00810857	0,8174
RN607	pH NaF, Mg ²⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00687337	0,7295
RN608	pH NaF, Mg ²⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00703662	0,8270
RN609	pH NaF, Mg ²⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00604645	0,7690
RN610	pH NaF, K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00808282	0,8319
RN611	pH NaF, K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00579999	0,8143
RN612	pH NaF, K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00876215	0,7956
RN613	pH NaF, K ⁺ , H ⁺ , m	[0,1]	[4 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00734871	0,8005
RN614	pH NaF, K ⁺ , H ⁺	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00758817	0,8087
RN615	pH NaF, K ⁺ , H ⁺	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00710247	0,7594
RN616	pH NaF, K ⁺ , m	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00663079	0,8097
RN617	pH NaF, K ⁺ , m	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00629495	0,7795
RN618	pH NaF, H ⁺ , m	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00624157	0,7934
RN619	pH NaF, H ⁺ , m	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00648323	0,7333
RN620	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00876084	0,7926
RN621	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00818686	0,7831
RN622	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	9	0,00979333	0,8003
RN623	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00749872	0,8089
RN624	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00471218	0,8375
RN625	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00698623	0,7923
RN626	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00450172	0,7837
RN627	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00913566	0,8503
RN628	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00530035	0,8390
RN629	pH NaF, K ⁺ , SB, V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	34	0,00422520	0,7974
RN630	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	32	0,00264642	0,8032
RN631	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00479840	0,8156
RN632	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00895336	0,7529
RN633	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00904083	0,7574
RN634	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00816905	0,8035
RN635	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	36	0,00446210	0,8280
RN636	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00500753	0,8595
RN637	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00485309	0,8767
RN638	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00655879	0,8260
RN639	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	30	0,00510385	0,8623
RN640	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[5 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00420006	0,8161
RN641	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00916250	0,8819
RN642	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	36	0,00448719	0,8473
RN643	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	33	0,00470391	0,8579
RN644	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00637897	0,8859
RN645	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00515820	0,8745
RN646	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00788369	0,8903
RN647	pH NaF, K ⁺ , SB, V	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	32	0,00582030	0,8054
RN648	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00498408	0,8552
RN649	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00270329	0,8524
RN650	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00529497	0,8604
RN651	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00330893	0,8936
RN652	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00627465	0,8672

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN653	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00427522	0,8712
RN654	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00482580	0,8582
RN655	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00519262	0,8855
RN656	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00563439	0,8626
RN657	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00331123	0,8853
RN658	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00759829	0,8769
RN659	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00349372	0,8266
RN660	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	35	0,00218938	0,8588
RN661	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00754233	0,8729
RN662	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00361785	0,8780
RN663	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00524208	0,8826
RN664	pH NaF, SB, Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 18 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00796584	0,8139
RN665	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00782322	0,8394
RN666	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00614442	0,8648
RN667	pH NaF, SB, V	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00553972	0,8059
RN668	pH NaF, SB, V	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00524228	0,8265
RN669	pH NaF, Al ³⁺ , V	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00428798	0,8413
RN670	pH NaF, Al ³⁺ , V	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00547287	0,8773
RN671	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00681051	0,8719
RN672	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00670940	0,8494
RN673	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00775236	0,8882
RN674	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00709766	0,8819
RN675	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00827272	0,8164
RN676	pH NaF, V	[0,1]	[2 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00662443	0,7339
RN677	pH NaF, V	[0,1]	[2 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00561545	0,6908
RN678	pH NaF, K ⁺ , SB	[0,1]	[3 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,01009250	0,7615
RN679	pH NaF, K ⁺ , SB	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00793979	0,8336
RN680	pH NaF, K ⁺ , SB	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00770489	0,8258
RN681	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00590201	0,8323
RN682	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00830481	0,8380
RN683	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00644860	0,8638
RN684	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00523590	0,8165
RN685	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00604557	0,8817
RN686	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00532566	0,8595
RN687	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00522336	0,8800
RN688	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00517834	0,8123
RN689	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00556343	0,7832
RN690	pH NaF, SB	[0,1]	[2 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00775577	0,7865
RN691	pH NaF, SB	[0,1]	[2 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00747960	0,7952
RN692	pH NaF, SB	[0,1]	[2 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00730904	0,7930
RN693	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00764495	0,8418
RN694	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00534056	0,8052
RN695	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00570597	0,6841
RN696	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[6 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00897228	0,8055
RN697	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00576060	0,7770
RN698	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00393795	0,8268
RN699	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[6 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00342078	0,8589
RN700	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00529497	0,8604
RN701	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[6 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00330893	0,8936
RN702	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00627465	0,8672
RN703	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , H+Al	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00427522	0,8712
RN704	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , H+Al	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00482580	0,8582
RN705	pH NaF, Ca ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00519262	0,8855
RN706	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00563439	0,8626
RN707	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00331123	0,8853
RN708	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00759829	0,8769
RN709	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00349372	0,8266
RN710	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	35	0,00218938	0,8588
RN711	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00754233	0,8729
RN712	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00361785	0,8780
RN713	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00524208	0,8826
RN714	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00796584	0,8139
RN715	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00782322	0,8394
RN716	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[5 18 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00614442	0,8648
RN717	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00553972	0,8059
RN718	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00524228	0,8265
RN719	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , K ⁺	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00428798	0,8413
RN720	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00547287	0,8773
RN721	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00772266	0,8892
RN722	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00602886	0,8378
RN723	pH NaF, Ca ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00502063	0,8688
RN724	pH NaF, Ca ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00532002	0,8378

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN725	pH NaF, Ca ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00822333	0,8006
RN726	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00705918	0,8802
RN727	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00571087	0,8648
RN728	pH NaF, Mg ²⁺ , K ⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00642238	0,8220
RN729	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	32	0,00912767	0,7848
RN730	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	34	0,00603157	0,7880
RN731	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00962854	0,8709
RN732	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00891291	0,8746
RN733	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00558520	0,8563
RN734	pH NaF, Ca ²⁺ , Mg ²⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00782414	0,8276
RN735	pH NaF, Ca ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00584936	0,8273
RN736	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00564580	0,8517
RN737	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00978313	0,7785
RN738	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00958266	0,7707
RN739	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00823552	0,7715
RN740	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	40	0,00478322	0,8155
RN741	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00828838	0,8217
RN742	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00615170	0,8436
RN743	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00567854	0,8481
RN744	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00558646	0,8585
RN745	pH NaF, Mg ²⁺ , Al ³⁺	[0,1]	[3 18 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00546549	0,8364
RN746	pH NaF, Mg ²⁺	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00783828	0,7072
RN747	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00595717	0,8568
RN748	pH NaF, pH H ₂ O	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00788671	0,6900
RN749	pH NaF, pH H ₂ O	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00839007	0,7360
RN750	pH NaF, pH H ₂ O	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00696745	0,7448
RN751	pH NaF, pH H ₂ O	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00807160	0,7919
RN752	pH NaF, pH H ₂ O	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00729711	0,6999
RN753	pH NaF, pH KCl	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00732409	0,7182
RN754	pH NaF, pH KCl	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00644624	0,7443
RN755	pH NaF, pH KCl	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00642314	0,7735
RN756	pH NaF, pH KCl	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00650053	0,7608
RN757	pH NaF, pH KCl	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00901291	0,7444
RN758	pH NaF, ΔpH	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00780805	0,7723
RN759	pH NaF, ΔpH	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00917333	0,7716
RN760	pH NaF, ΔpH	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00795168	0,7855
RN761	pH NaF, ΔpH	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00851819	0,8342
RN762	pH NaF, ΔpH	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00659576	0,7662
RN763	pH NaF, ΔpH	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00909145	0,8171
RN764	pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00791593	0,8061
RN765	pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00888528	0,8040
RN766	pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00806146	0,7613
RN767	pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00734945	0,7134
RN768	pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00956607	0,7819
RN769	pH NaF, Ca ²⁺	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00896241	0,8228
RN770	pH NaF, K ⁺	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00974310	0,7960
RN771	pH NaF, K ⁺	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00949887	0,8048
RN772	pH NaF, K ⁺	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00955710	0,8059
RN773	pH NaF, K ⁺	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00947784	0,7948
RN774	pH NaF, K ⁺	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00951624	0,8025
RN775	pH NaF, K ⁺	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	33	0,00947153	0,7935
RN776	pH NaF, Na ⁺	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00678141	0,8245
RN777	pH NaF, Na ⁺	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00757044	0,8236
RN778	pH NaF, Na ⁺	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00626526	0,8139
RN779	pH NaF, Na ⁺	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00572333	0,8070
RN780	pH NaF, Na ⁺	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00705385	0,7669
RN781	pH NaF, Na ⁺	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00761361	0,8117
RN782	pH NaF, H ⁺	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00636130	0,8329
RN783	pH NaF, H ⁺	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00642057	0,7810
RN784	pH NaF, H ⁺	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00677816	0,7556
RN785	pH NaF, H ⁺	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00670263	0,7719
RN786	pH NaF, H ⁺	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00575836	0,7862
RN787	pH NaF, H ⁺	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00689995	0,8425
RN788	pH NaF, H ⁺	[0,1]	[2 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00952746	0,8203
RN789	pH NaF, H ⁺	[0,1]	[2 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00750427	0,7971
RN790	pH NaF, T	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00780472	0,7878
RN791	pH NaF, T	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00576736	0,7716
RN792	pH NaF, T	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00751065	0,7509
RN793	pH NaF, T	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00525609	0,7432
RN794	pH NaF, T	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00584781	0,8084
RN795	pH NaF, T	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00837232	0,8367
RN796	pH NaF, T	[0,1]	[2 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00711271	0,8171

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN797	pH NaF, m	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00554949	0,7992
RN798	pH NaF, m	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00587681	0,8176
RN799	pH NaF, m	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00782998	0,7049
RN800	pH NaF, m	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00640442	0,7764
RN801	pH NaF, m	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00475445	0,7716
RN802	pH NaF, m	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00799751	0,7825
RN803	pH NaF, m	[0,1]	[2 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00620631	0,7745
RN804	pH NaF, C	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00934695	0,7996
RN805	pH NaF, C	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00959217	0,6857
RN806	pH NaF, C	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00901587	0,8252
RN807	pH NaF, C	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00615261	0,8374
RN808	pH NaF, C	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00719490	0,7773
RN809	pH NaF, C	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	44	0,00715748	0,8127
RN810	pH NaF, C	[0,1]	[2 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,01005050	0,7685
RN811	pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00657580	0,8033
RN812	pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00878091	0,7517
RN813	pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00674299	0,7381
RN814	pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00546586	0,8050
RN815	pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00507665	0,7681
RN816	pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00958546	0,8340
RN817	pH NaF, SiO ₂	[0,1]	[2 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00970715	0,8249
RN818	pH NaF, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[2 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00584334	0,6747
RN819	pH NaF, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[2 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	9	0,00818464	0,7491
RN820	pH NaF, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[2 20 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00503948	0,6584
RN821	pH NaF, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[2 25 1]	LOGSIG	TRAINLM	8	0,00616682	0,6746
RN822	pH NaF, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[2 30 1]	LOGSIG	TRAINLM	9	0,00619233	0,7684
RN823	pH NaF, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00638834	0,7082
RN824	pH NaF, Fe ₂ O ₃	[0,1]	[2 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00668670	0,6725
RN825	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 1 1]	LOGSIG	TRAINLM	33	0,00519364	0,7632
RN826	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00547505	0,7987
RN827	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00556110	0,7096
RN828	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00426993	0,7921
RN829	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00407512	0,8077
RN830	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00500322	0,7986
RN831	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00594184	0,8300
RN832	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00480830	0,6622
RN833	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00414688	0,8017
RN834	pH NaF, ΔpH, H ⁺ , T, C, SiO ₂	[0,1]	[6 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00515901	0,6260
RN835	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[7 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00495897	0,7889
RN836	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[7 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00271131	0,8608
RN837	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[7 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00497341	0,8981
RN838	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[7 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00662747	0,8611
RN839	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[7 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00384009	0,8439
RN840	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[7 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00392306	0,7717
RN841	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[7 10 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	30	0,00203348	0,7904
RN842	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00834689	0,7019
RN843	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00461677	0,7473
RN844	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00459219	0,8221
RN845	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00616153	0,7351
RN846	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00366830	0,8467
RN847	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00619328	0,7485
RN848	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00395285	0,7495
RN849	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	36	0,00210053	0,8410
RN850	pH NaF, pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	30	0,00373859	0,8950
RN851	pH NaF, pH H ₂ O, SB, C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00262386	0,7870
RN852	pH NaF, pH H ₂ O, SB, C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00674842	0,8208
RN853	pH NaF, pH H ₂ O, SB, C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00792428	0,7269
RN854	pH NaF, pH H ₂ O, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00258104	0,6379
RN855	pH NaF, pH H ₂ O, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00696323	0,6930
RN856	pH NaF, pH H ₂ O, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00456179	0,7373

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
	H+Al							
RN857	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00327672	0,8496
RN858	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00259466	0,8135
RN859	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	33	0,00197774	0,7903
RN860	pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,03762180	0,2605
RN861	pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	7	0,05237600	0,1812
RN862	pH H ₂ O, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,04661590	0,3924
RN863	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00484544	0,7870
RN864	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00431733	0,8722
RN865	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00543309	0,8150
RN866	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00840589	0,7203
RN867	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00500368	0,8823
RN868	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00502460	0,7873
RN869	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00596568	0,8652
RN870	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00466932	0,8705
RN871	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 9 1]	TANSIG	TRAINLM	25	0,00348780	0,8168
RN872	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[6 9 1]	LOGSIG	TRAINRP	16	0,00935588	0,6663
RN873	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00489081	0,8232
RN874	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00351681	0,7889
RN875	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃	[0,1]	[5 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00564312	0,8269
RN876	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[5 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00387084	0,8514
RN877	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00368361	0,8794
RN878	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[5 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	33	0,00350265	0,8658
RN879	pH NaF, SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[5 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00418910	0,7863
RN880	pH NaF, SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00501929	0,7791
RN881	pH NaF, SB, Al ³⁺ , Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[5 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00636773	0,8210
RN882	pH NaF, SB, C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[5 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00250332	0,7898
RN883	pH NaF, SB, C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00692544	0,8128
RN884	pH NaF, SB, C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[5 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00863154	0,8542
RN885	pH NaF, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[5 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00715736	0,7888
RN886	pH NaF, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[5 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00610943	0,8427
RN887	pH NaF, Al ³⁺ , C, Al ₂ O ₃ , H+Al	[0,1]	[5 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00581131	0,8591
RN888	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[5 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00732992	0,7882
RN889	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[5 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00623916	0,8051
RN890	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[5 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00282147	0,8510
RN891	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[5 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00377664	0,8139
RN892	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[5 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00458019	0,8586
RN893	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[5 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00323055	0,8610
RN894	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00615530	0,8417
RN895	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00510363	0,8594
RN896	pH NaF, SB, Al ³⁺ , C	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00416018	0,8415
RN897	pH NaF, SB, Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	36	0,00360884	0,8213
RN898	pH NaF, SB, Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00532952	0,8218
RN899	pH NaF, SB, Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	38	0,00351533	0,8784
RN900	pH NaF, SB, C, H+Al	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00989089	0,7965
RN901	pH NaF, SB, C, H+Al	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00471394	0,8228
RN902	pH NaF, SB, C, H+Al	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00651977	0,8307
RN903	pH NaF, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00580556	0,8804
RN904	pH NaF, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00648868	0,8215
RN905	pH NaF, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[4 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00586341	0,8562
RN906	pH NaF, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[4 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00590139	0,8564
RN907	pH NaF, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[4 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00816267	0,7975
RN908	pH NaF, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[4 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00610429	0,8598
RN909	pH NaF, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[4 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00540185	0,8613
RN910	pH NaF, Al ³⁺ , C, H+Al	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00632791	0,8511
RN911	pH NaF, Al ³⁺ , C	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00736135	0,8460
RN912	pH NaF, Al ³⁺ , H+Al	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00656945	0,8860
RN913	pH NaF, C, H+Al	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,07719930	0,7836
RN914	pH NaF, Al ³⁺ , Kr	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00460663	0,7551
RN915	pH NaF, Al ³⁺ , Kr	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00564378	0,7617
RN916	pH NaF, Al ³⁺ , Kr	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00747699	0,8037
RN917	pH NaF, Al ³⁺ , Kr	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00884720	0,8198
RN918	pH NaF, Al ³⁺ , Kr	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00464085	0,8275
RN919	pH NaF, Al ³⁺ , Kr	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00636490	0,7538
RN920	pH NaF, Al ³⁺ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00421873	0,8047
RN921	pH NaF, Al ³⁺ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00499930	0,7884
RN922	pH NaF, Al ³⁺ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00615456	0,7819
RN923	pH NaF, Al ³⁺ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00649341	0,8102
RN924	pH NaF, Al ³⁺ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00532628	0,7704
RN925	pH NaF, Al ³⁺ , Fe ₂ O ₃	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00373598	0,8188
RN926	pH NaF, Al ³⁺ , SiO ₂	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00499424	0,7384
RN927	pH NaF, Al ³⁺ , SiO ₂	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00624151	0,8672

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN928	pH NaF, Al ³⁺ , SiO ₂	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00506346	0,7616
RN929	pH NaF, Al ³⁺ , SiO ₂	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,01033310	0,8638
RN930	pH NaF, Al ³⁺ , SiO ₂	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00521122	0,7890
RN931	pH NaF, Al ³⁺ , SiO ₂	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00653024	0,8269
RN932	pH NaF, Al ³⁺ , H ⁺	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00573557	0,8124
RN933	pH NaF, Al ³⁺ , H ⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00560499	0,8146
RN934	pH NaF, Al ³⁺ , H ⁺	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00633427	0,7997
RN935	pH NaF, Al ³⁺ , H ⁺	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00864718	0,7711
RN936	pH NaF, Al ³⁺ , H ⁺	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00552791	0,6976
RN937	pH NaF, Al ³⁺ , H ⁺	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00617069	0,8236
RN938	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00712372	0,8236
RN939	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00648707	0,8095
RN940	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	10	0,00906565	0,8425
RN941	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00878444	0,8774
RN942	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	38	0,00742280	0,8186
RN943	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00576709	0,8934
RN944	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00938211	0,7624
RN945	pH NaF, Al ³⁺ , pH KCl	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00595016	0,7782
RN946	pH NaF, Al ³⁺ , pH KCl	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00671875	0,8282
RN947	pH NaF, Al ³⁺ , pH KCl	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00742280	0,8644
RN948	pH NaF, Al ³⁺ , pH KCl	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00989944	0,7861
RN949	pH NaF, Al ³⁺ , pH KCl	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00788135	0,8245
RN950	pH NaF, Al ³⁺ , pH KCl	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00840442	0,7946
RN951	pH NaF, Al ³⁺ , Ki	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00805937	0,7918
RN952	pH NaF, Al ³⁺ , Ki	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	9	0,00870548	0,8072
RN953	pH NaF, Al ³⁺ , Ki	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00546442	0,8355
RN954	pH NaF, Al ³⁺ , Ki	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00517297	0,8239
RN955	pH NaF, Al ³⁺ , Ki	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00478199	0,8154
RN956	pH NaF, Al ³⁺ , Ki	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00551248	0,7838
RN957	pH NaF, Al ³⁺ , m	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00561191	0,8376
RN958	pH NaF, Al ³⁺ , m	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00512388	0,8163
RN959	pH NaF, Al ³⁺ , m	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00952864	0,8347
RN960	pH NaF, Al ³⁺ , m	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00805935	0,7279
RN961	pH NaF, Al ³⁺ , m	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00620226	0,8187
RN962	pH NaF, Al ³⁺ , m	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00417522	0,8642
RN963	pH NaF, Al ³⁺ , m	[0,1]	[3 18 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00404877	0,8684
RN964	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00612221	0,7950
RN965	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	13	0,00843080	0,9050
RN966	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	9	0,01224330	0,7986
RN967	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00935054	0,8741
RN968	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00616284	0,7926
RN969	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00472498	0,8060
RN970	pH NaF, Al ³⁺ , Na ⁺	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00466688	0,8339
RN971	pH NaF, Al ³⁺ , Na ⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00454498	0,8719
RN972	pH NaF, Al ³⁺ , Na ⁺	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00776535	0,8186
RN973	pH NaF, Al ³⁺ , Na ⁺	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	30	0,00520416	0,8311
RN974	pH NaF, Al ³⁺ , Na ⁺	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00405283	0,8636
RN975	pH NaF, Al ³⁺ , Na ⁺	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00482277	0,7627
RN976	pH NaF, Al ³⁺ , pH H ₂ O	[0,1]	[3 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00778067	0,7893
RN977	pH NaF, Al ³⁺ , pH H ₂ O	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00619226	0,8085
RN978	pH NaF, Al ³⁺ , pH H ₂ O	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00864567	0,8357
RN979	pH NaF, Al ³⁺ , pH H ₂ O	[0,1]	[3 3 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00754913	0,7796
RN980	pH NaF, Al ³⁺ , pH H ₂ O	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00501036	0,8520
RN981	pH NaF, Al ³⁺ , pH H ₂ O	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00709369	0,8750
RN982	pH NaF, Al ³⁺ , pH H ₂ O	[0,1]	[3 18 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00486325	0,7415
RN983	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00800400	0,8098
RN984	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00560184	0,9042
RN985	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00515662	0,8909
RN986	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 10 1]	TANSIG	TRAINLM	8	0,00643131	0,8113
RN987	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00546524	0,8993
RN988	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG/PURELIN	TRAINLM	9	0,00690599	0,8080
RN989	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINRP	23	0,01328680	0,8234
RN990	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINSCG	25	0,00873707	0,8689
RN991	pH NaF, Al ³⁺ , T	[-1,1]	[3 10 1]	TANSIG	TRAINLM	18	0,01938680	0,7962
RN992	pH NaF, Al ³⁺ , T	[-1,1]	[3 10 1]	LOGSIG/LOGSIG	TRAINLM	17	0,44116600	0,5468
RN993	pH NaF, Al ³⁺ , T	[-1,1]	[3 15 1]	TANSIG	TRAINLM	11	0,01928080	0,8421
RN994	pH NaF, Al ³⁺ , T	[-1,1]	[3 20 1]	TANSIG	TRAINLM	8	0,01959660	0,8047
RN995	pH NaF, Al ³⁺ , T	[-1,1]	[3 5 1]	TANSIG	TRAINLM	9	0,02184110	0,8264
RN996	pH NaF, Al ³⁺ , V	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00596951	0,7035
RN997	pH NaF, Al ³⁺ , V	[0,1]	[3 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	16	0,00767733	0,8362
RN998	pH NaF, Al ³⁺ , V	[0,1]	[3 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00690470	0,8266
RN999	pH NaF, Al ³⁺ , V	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00545344	0,8399

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN1000	pH NaF, Al ³⁺ , V	[0,1]	[3 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	27	0,00449070	0,7881
RN1001	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00390127	0,8803
RN1002	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 14 1]	TANSIG	TRAINLM	18	0,00392304	0,8547
RN1003	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 14 1]	TANSIG	TRAINLM	22	0,00385932	0,8646
RN1004	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINRP	32	0,00656278	0,8645
RN1005	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[0,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINSCG	25	0,00807848	0,8356
RN1006	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[-1,1]	[4 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,01077970	0,8567
RN1007	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[-1,1]	[4 14 1]	TANSIG	TRAINLM	15	0,01258730	0,8479
RN1008	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[-1,1]	[4 12 1]	TANSIG	TRAINLM	12	0,01249860	0,8539
RN1009	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[-1,1]	[4 10 1]	TANSIG	TRAINLM	13	0,01122630	0,8221
RN1010	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[-1,1]	[4 11 1]	TANSIG	TRAINLM	23	0,00829305	0,8505
RN1011	pH NaF, K ⁺ , Al ³⁺ , V	[-1,1]	[4 13 1]	TANSIG	TRAINLM	9	0,01449850	0,8745
RN1012	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00689091	0,8327
RN1013	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	31	0,00457338	0,8556
RN1014	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00706791	0,9094
RN1015	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 17 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00577941	0,8640
RN1016	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 18 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00587825	0,8188
RN1017	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 16 1]	TANSIG	TRAINLM	15	0,00657231	0,8202
RN1018	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00616242	0,8539
RN1019	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINRP	20	0,00837812	0,8789
RN1020	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINRP	12	0,00950568	0,8312
RN1021	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINSCG	31	0,00641593	0,8456
RN1022	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINSCG	19	0,00698974	0,8298
RN1023	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[-1,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,44087600	0,4499
RN1024	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[-1,1]	[3 16 1]	TANSIG	TRAINLM	15	0,01743990	0,8413
RN1025	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[-1,1]	[3 16 1]	TANSIG	TRAINLM	8	0,02200020	0,8625
RN1026	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[-1,1]	[3 15 1]	TANSIG	TRAINLM	9	0,02109790	0,8478
RN1027	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[-1,1]	[3 14 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,02124870	0,8398
RN1028	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[-1,1]	[3 17 1]	TANSIG	TRAINLM	7	0,01992150	0,8854
RN1029	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[-1,1]	[3 18 1]	TANSIG	TRAINLM	17	0,01796220	0,8798
RN1030	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[-1,1]	[3 19 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,02376540	0,8235
RN1031	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 18 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00503047	0,8291
RN1032	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	25	0,00504913	0,8618
RN1033	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	20	0,00504509	0,8228
RN1034	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	11	0,00753775	0,8808
RN1035	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 12 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00546935	0,8829
RN1036	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00523548	0,8609
RN1037	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 15 1]	TANSIG	TRAINLM	16	0,00547975	0,8078
RN1038	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	23	0,00542774	0,8724
RN1039	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,00632702	0,8726
RN1040	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 15 1]	LOGSIG	TRAINRP	29	0,00661561	0,8998
RN1041	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 15 1]	LOGSIG	TRAINRP	21	0,00646665	0,8712
RN1042	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[0,1]	[4 15 1]	LOGSIG	TRAINSCG	7	0,01614830	0,7327
RN1043	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[-1,1]	[4 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,44139500	0,5489
RN1044	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[-1,1]	[4 15 1]	TANSIG	TRAINLM	21	0,01338720	0,8386
RN1045	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[-1,1]	[4 15 1]	TANSIG	TRAINLM	9	0,02502550	0,8579
RN1046	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[-1,1]	[4 16 1]	TANSIG	TRAINLM	9	0,02075920	0,8463
RN1047	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[-1,1]	[4 13 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,02173380	0,8966
RN1048	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[-1,1]	[4 12 1]	TANSIG	TRAINLM	19	0,01902940	0,8471
RN1049	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[-1,1]	[4 13 1]	TANSIG	TRAINLRP	20	0,02672020	0,7847
RN1050	pH NaF, K ⁺ , SB, Al ³⁺	[-1,1]	[4 13 1]	TANSIG	TRAINLSC	26	0,02199790	0,8326
G								
RN1051	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 6 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00852973	0,8295
RN1052	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	32	0,00493175	0,8768
RN1053	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	22	0,00555741	0,8650
RN1054	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	24	0,00513296	0,8553
RN1055	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 11 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00547808	0,8587
RN1056	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 13 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00499789	0,8728
RN1057	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	26	0,00510910	0,8911
RN1058	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 15 1]	LOGSIG	TRAINLM	19	0,00569612	0,8867
RN1059	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	18	0,00525404	0,8511
RN1060	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	TANSIG	TRAINLM	23	0,00506232	0,9155
RN1061	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	TANSIG	TRAINLM	13	0,00545169	0,8084
RN1062	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINLM	8	0,00891503	0,8289
RN1063	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINRP	21	0,00701535	0,9171
RN1064	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINRP	26	0,00681824	0,8588
RN1065	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINSCG	29	0,00696237	0,8253
RN1066	pH NaF, SB, Al ³⁺	[-1,1]	[3 14 1]	TANSIG	TRAINLM	8	0,01945750	0,8262
RN1067	pH NaF, SB, Al ³⁺	[-1,1]	[3 14 1]	TANSIG	TRAINLM	7	0,01975120	0,8313
RN1068	pH NaF, SB, Al ³⁺	[-1,1]	[3 12 1]	TANSIG	TRAINLM	14	0,01861980	0,8636
RN1069	pH NaF, SB, Al ³⁺	[-1,1]	[3 16 1]	TANSIG	TRAINLM	13	0,01694350	0,8514

Nº	Variáveis de Entrada	Norm.	Arquitetura	Função de Ativação	Algoritmo de Treinamento	Ciclos	Desempenho Treinamento (EQM)	Desempenho Validação (R ²)
RN1070	pH NaF, SB, Al ³⁺	[-1,1]	[3 13 1]	TANSIG	TRAINLM	9	0,02036400	0,8682
RN1071	pH NaF, SB, Al ³⁺	[-1,1]	[3 11 1]	TANSIG	TRAINLM	9	0,02085010	0,7938
RN1072	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 2 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,01252660	0,8373
RN1073	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 4 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00945794	0,8258
RN1074	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 5 1]	LOGSIG	TRAINLM	12	0,01149270	0,7979
RN1075	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 8 1]	LOGSIG	TRAINLM	21	0,00632116	0,8627
RN1076	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	29	0,00581533	0,8540
RN1077	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	28	0,00676295	0,8703
RN1078	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 9 1]	LOGSIG	TRAINLM	15	0,00922659	0,8618
RN1079	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 9 1]	TANSIG	TRAINLM	12	0,00595965	0,7995
RN1080	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 9 1]	TANSIG	TRAINLM	10	0,00675530	0,8056
RN1081	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 9 1]	LOGSIG	TRAINRP	15	0,00941498	0,7913
RN1082	pH NaF, Al ³⁺	[0,1]	[2 9 1]	LOGSIG	TRAINSCG	23	0,00928361	0,7780
RN1083	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	LOGSIG	TRAINRP	22	0,00890665	0,8632
RN1084	pH NaF, SB, Al ³⁺	[0,1]	[3 14 1]	TANSIG	TRAINLM	38	0,00499056	0,8777
RN1085	pH NaF, Al ³⁺ , ΔpH	[0,1]	[3 16 1]	LOGSIG	TRAINLM	17	0,00682925	0,8589
RN1086	pH NaF, Al ³⁺ , T	[0,1]	[3 10 1]	LOGSIG	TRAINLM	14	0,00950314	0,8443