

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

LIS CAMPOS DE QUADROS

EMPREGO DE REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS NA CORREÇÃO DE
CONCENTRAÇÕES SIMULADAS PELO MODELO DE QUALIDADE DO AR
MODELAR

CURITIBA

2015

LIS CAMPOS DE QUADROS

EMPREGO DE REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS NA CORREÇÃO DE
CONCENTRAÇÕES SIMULADAS PELO MODELO DE QUALIDADE DO AR
MODELAR

Dissertação apresentada como requisito parcial
à obtenção do grau de Mestre em Engenharia
Ambiental, no Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Ambiental, Setor de tecnologia,
Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Ricardo Carvalho de
Almeida

CURITIBA

2015

Q1 Quadros, Lis Campos de
Emprego de redes neurais artificiais na correção de concentrações simuladas pelo modelo de qualidade do ar modelar / Lis Campos de Quadros. Curitiba, 2015.
104f. : il. [algumas color.] ; 30 cm.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental, 2015.

Orientador: Ricardo Carvalho de Almeida

1. Engenharia ambiental. 2. Qualidade do ar. 3. Redes neurais. I. Almeida, Ricardo Carvalho de. II. Título.

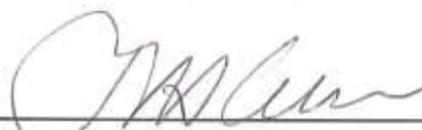
CDD: 628

TERMO DE APROVAÇÃO

LIS CAMPOS DE QUADROS

EMPREGO DE REDES NEURAIIS ARTIFICIAIS NA CORREÇÃO DE CONCENTRAÇÕES SIMULADAS PELO MODELO DE QUALIDADE DO AR MODELAR

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Setor de Tecnologia, da Universidade Federal do Paraná, pela seguinte banca examinadora:



Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Almeida
Orientador – Departamento de Engenharia Ambiental, UFPR



Dra. Diana Maria Cancelli
ENVEX Engenharia e Consultoria Ambiental



Dr. Emilio Graciliano Ferreira Mercuri
Departamento de Engenharia Ambiental, UFPR

Curitiba, 27 de agosto de 2015

AGRADECIMENTOS

Aos meus amados pais, Elisa Campos de Quadros e Carlos Rodaka de Quadros, cujo suporte incondicional me permitiu concretizar mais esta etapa da minha vida. Obrigada por acreditarem em mim e pela compreensão nos momentos difíceis. Obrigada por todo o amor e por todo o carinho, que aliviam a dor do caminhar e tornam mais doce a alegria da conquista.

A meu querido avô, Manuel Campos Vidal, cujos ensinamentos ainda se fazem tão presentes em minha vida. Obrigada por me ensinar o que é dedicação e perseverança. E acima de tudo, obrigada por instigar em mim a sede por conhecimento.

Ao Maximiliano por ser meu companheiro de jornada e meu porto seguro. Seu apoio e seu amor me fazem ir mais longe.

Ao meu orientador, Professor Dr. Ricardo Carvalho de Almeida, por toda a confiança em mim depositada. Obrigada por acreditar no meu trabalho e por ter sido um parceiro com quem sempre pude contar ao longo da execução deste projeto. Obrigada por todos os ensinamentos a mim transmitidos com tanta maestria, carinho e dedicação. Seu profissionalismo é muito inspirador para mim.

A J. S. Irwin sem cuja base de dados, a realização deste projeto não seria possível.

RESUMO

De forma geral, os modelos de dispersão atmosférica para fins regulatórios apresentam limitações quanto a sua acurácia, já que estão sujeitos a diversas fontes de erro relacionadas especialmente à natureza estocástica da turbulência atmosférica. Sendo assim, o presente trabalho propõe a aplicação de redes neurais artificiais como um mecanismo de pós-processamento das previsões que deve agir corrigindo os valores de concentração simulados, tornando-os mais próximos dos valores reais observados. Para tanto, foram treinadas duas redes neurais artificiais do tipo *perceptron* multicamadas por meio do algoritmo de treinamento *backpropagation*. Uma foi aplicada aos cenários em que a estabilidade atmosférica foi considerada estável enquanto a outra foi aplicada ao conjunto de cenários para os quais a estabilidade atmosférica foi considerada neutra ou instável. Os dados utilizados para as fases de treinamento, teste e validação das redes neurais são oriundos de experimentos de dispersão atmosférica já consagrados na literatura (*i.e.* Copenhagen, Cabauw, Hanford 64, Hanford 67, Hanford 83, Lillestrom, Prairie Grass). O modelo de interesse para o presente estudo é o MODELAR, modelo de qualidade do ar desenvolvido para simular emissões contínuas oriundas de uma fonte pontual e elevada. Os resultados corroboram a aplicabilidade das redes neurais associadas a modelos de dispersão, uma vez que, em todos os casos analisados, a utilização da rede foi capaz de melhorar de forma significativa a totalidade dos parâmetros estatísticos analisados, melhorando a acurácia das previsões e, portanto, tornando-as mais confiáveis

Palavras-chave: modelo de dispersão atmosférica, rede neural artificial, qualidade do ar.

ABSTRACT

In general, the atmospheric dispersion models for regulatory purposes have limitations regarding its accuracy, as they are subject to several sources of error, especially the ones related to the stochastic nature of atmospheric turbulence. Therefore, this paper proposes the application of artificial neural networks as a post-processing tool that when applied to the model predictions should correct the simulated concentration values, making them closer to the actual observed values. To this end, two artificial neural networks (of the multilayer perceptron type) were trained through the backpropagation training algorithm. One was applied to the scenarios where atmospheric stability was considered stable while the other was applied to the cases where atmospheric stability was considered neutral or unstable. The data used for training, testing and validation of the neural networks derive from atmospheric dispersion experiments already established in the literature (*i.e.* Copenhagen, Cabauw, Hanford 64, Hanford 67, Hanford 83, Lillestrom, Prairie Grass). The model of interest for this study is MODELAR, an air quality model developed to simulate continuous emissions from an elevated point source. The results corroborate the applicability of the neural networks in association with dispersion models, since, in all the analyzed cases, the use of the artificial network was able to significantly improve the totality of the statistical parameters analyzed, improving the accuracy of the predictions and, therefore, making it more reliable.

Palavras-chave: atmospheric dispersion model, artificial neural network, air quality.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Diagrama ilustrando o aparecimento de instabilidade dinâmica e turbulência por meio de ondas de Kelvin-Helmholtz	31
Figura 2 - Relações entre estabilidade estática e dinâmica e o número de Richardson	31
Figura 3 - Modelo genérico de um experimento de dispersão atmosférica com traçador	34
Figura 4 - Esquema demonstrativo do Experimento de Copenhagen	36
Figura 5 - Esquema representativo de uma rede neural artificial multicamada	43
Figura 6 - Perfil da velocidade do vento	56
Figura 7 - Funções de ativação a) função identidade; b) função tangente hiperbólica delimitada entre [-1:1].....	58
Figura 8 - Fluxograma do treinamento da rede neural por meio do algoritmo <i>backpropagation</i>	59
Figura 9 - Evolução do erro para os conjuntos de treinamento e teste ao longo das épocas de treinamento.	61
Figura 10 - Histogramas da distribuição dos dados de concentração observada (a) e do logaritmo natural das concentrações observadas (b) para os dados estáveis.	68
Figura 11 - Histogramas da distribuição dos dados de concentração observada (a) e do logaritmo natural das concentrações observadas (b) para os dados neutros e instáveis.	69
Figura 12 - Representação gráfica da rede neural artificial utilizada nos casos estáveis	73
Figura 13 - Diagrama de dispersão para a Simulação 01 do Teste 06 para os casos estáveis	77
Figura 14 - Representação gráfica da rede neural artificial utilizada no conjunto dos casos neutros e instáveis	79

Figura 15 - Diagrama de dispersão para a Simulação 01 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	83
Figura 16 - Diagrama de dispersão para a Simulação 02 do Teste 06 para os casos estáveis	95
Figura 17 - Diagrama de dispersão para a Simulação 03 do Teste 06 para os casos estáveis	96
Figura 18 - Diagrama de dispersão para a Simulação 04 do Teste 06 para os casos estáveis	96
Figura 19 - Diagrama de dispersão para a Simulação 05 do Teste 06 para os casos estáveis	97
Figura 20 - Diagrama de dispersão para a Simulação 06 do Teste 06 para os casos estáveis	97
Figura 21 - Diagrama de dispersão para a Simulação 07 do Teste 06 para os casos estáveis	98
Figura 22 - Diagrama de dispersão para a Simulação 08 do Teste 06 para os casos estáveis	98
Figura 23 - Diagrama de dispersão para a Simulação 09 do Teste 06 para os casos estáveis	99
Figura 24 - Diagrama de dispersão para a Simulação 10 do Teste 06 para os casos estáveis	99
Figura 25 - Diagrama de dispersão para a Simulação 02 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	100
Figura 26 - Diagrama de dispersão para a Simulação 03 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	101
Figura 27 - Diagrama de dispersão para a Simulação 04 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	101
Figura 28 - Diagrama de dispersão para a Simulação 05 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	101

Figura 29 - Diagrama de dispersão para a Simulação 06 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	101
Figura 30 - Diagrama de dispersão para a Simulação 07 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	101
Figura 31 - Diagrama de dispersão para a Simulação 08 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	101
Figura 32 - Diagrama de dispersão para a Simulação 09 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	101
Figura 33 - Diagrama de dispersão para a Simulação 10 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis	101

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Resumo da quantidade de dados de cada experimento com suas respectivas fontes	54
Tabela 2 - Valores tidos como ideais e intervalos definidos como bons para os parâmetros estatísticos analisados	64
Tabela 3 - Testes com diferentes variáveis como dados de entrada da rede neural	66
Tabela 4 - Concentrações negativas presentes nas simulações do Teste 01 (Cenário de estabilidade atmosférica estável sem a aplicação da transformação logarítmica)	71
Tabela 5 - Média dos parâmetros estatísticos de todas as simulações realizadas para o Teste 01 (Cenário de estabilidade atmosférica estável sem a aplicação da transformação logarítmica).....	72
Tabela 6 - Estatísticas das 10 simulações realizadas para o Teste 06 para os casos estáveis aplicando-se o logaritmo natural	74
Tabela 7 - Média dos parâmetros estatísticos de todas as simulações realizadas para o Teste 06 (Cenário de estabilidade atmosférica estável com a aplicação da transformação logarítmica).....	76
Tabela 8 - Estatísticas das 10 simulações realizadas para o Teste 05 para os casos neutros e instáveis aplicando-se o logaritmo natural.....	81
Tabela 9 - Média dos parâmetros estatísticos de todas as simulações realizadas para o Teste 05 (Cenário de estabilidade atmosférica neutra e instável com a aplicação da transformação logarítmica).....	82

LISTA DE SÍMBOLOS

a	variável auxiliar
a_1	variável auxiliar
a_2	variável auxiliar
a_3	variável auxiliar
B	flutuabilidade
C	concentração média do escalar de interesse
\bar{C}	concentração média integrada na direção normal ao vento
C_c	concentração integrada na direção transversal ao vento e normalizada pela taxa de emissão corrigida pela rede neural
C_{prev}	concentração integrada na direção transversal ao vento e normalizada pela taxa de emissão prevista pelo MODELAR
C_{Sperim}	concentração experimental
C_{SPM+RN}	concentração prevista pelo modelo SPM e corrigida pela rede neural
c_p	calor específico do ar a pressão constante
d	distância entre a fonte de emissão e o ponto de interesse
f	parâmetro de Coriolis
$Fac2$	fator de dois
$Fac2 (\%)$	fator de dois em percentagem
FB	desvio fracional
\overline{FB}	média do desvio fracional
FS	desvio fracional padrão
\overline{FS}	média do desvio fracional padrão
g	aceleração da gravidade
H_0	fluxo vertical de calor turbulento na superfície
H_s	altura da fonte
hbl	espessura da camada limite atmosférica
$htztc$	altura na qual a temperatura do ar foi medida
K_x	coeficiente de difusão turbulenta na direção longitudinal
K_y	coeficiente de difusão turbulenta na direção transversal
K_z	coeficiente de difusão turbulenta na direção vertical
L	comprimento de Monin-Obukhov
M	geração mecânica de turbulência
$NMSE$	erro quadrático médio normalizado
\overline{NMSE}	média do erro quadrático médio normalizado
NO_x	óxidos de nitrogênio
Q	taxa de emissão da fonte
R	correlação de Pearson
\bar{R}	média da correlação de Pearson
R_c	valor crítico do número de Richardson
R_i	número adimensional de Richardson

R_t	valor do número de Richardson que indica o fim da turbulência
S	reações capazes de alterar a concentração do escalar de interesse
SF_6	hexafluoreto de enxofre
SO_2	dióxido de enxofre
t	tempo
$tztc$	medida de temperatura do ar próximo à superfície
U	velocidade máxima do vento na direção x
\bar{u}	componente na direção x da velocidade média do vento
u_*	velocidade de fricção
u_{*0}	velocidade de fricção na superfície
\overline{uw}	covariância das flutuações das componentes u e w da velocidade
\bar{v}	componente na direção y da velocidade média do vento
w_*	escala convectiva da velocidade
$\overline{w\theta_0}$	covariância entre as flutuações da componente w da velocidade e da temperatura potencial em z_0 (representa fluxo de calor na superfície)
$\overline{w\theta_v} _0$	a covariância entre as flutuações na superfície da componente w da velocidade e da temperatura potencial virtual
x	posição ao longo do sentido do vento (eixo x)
X_o	grandeza observada
$\overline{X_o}$	média da grandeza observada
X_p	grandeza prevista
$\overline{X_p}$	média da grandeza prevista
y	posição ao longo do sentido transversal ao vento (eixo y)
z	posição ao longo do sentido vertical ao vento (eixo z)
z_0	altura de rugosidade aerodinâmica
ZnS	sulfeto de zinco
δ	função Delta de Dirac
ζ	parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov
$\overline{\theta_v}$	temperatura potencial virtual média
θ_*	escala característica de temperatura
θ_v	temperatura potencial virtual
κ	constante de von Karman
Λ	comprimento local de Monin-Obukhov
ρ	densidade do ar
σ_o	desvio padrão da grandeza observada
σ_p	desvio padrão da grandeza prevista
σ_y	parâmetro que caracteriza o espalhamento transversal da pluma
τ_0	fluxo vertical turbulento de quantidade de movimento
ϕ	latitude do ponto de interesse
Ψ_m	função de similaridade para o perfil do vento
Ω	velocidade angular de rotação da Terra

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	14
1.1 OBJETIVO GERAL	16
1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	16
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	18
2.1 MODELOS MATEMÁTICOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA.....	18
2.1.1 Incertezas nos modelos de dispersão atmosférica.....	20
2.2 MODELAR	22
2.3 ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA	29
2.4 EXPERIMENTOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA.....	33
2.4.1 Experimento de Copenhagen.....	35
2.4.2 Experimento de Cabauw	37
2.4.3 Os Experimentos de Hanford.....	38
2.4.3.1 Experimento de Hanford série 1964 (Hanford 64)	39
2.4.3.2 Experimento de Hanford série 1967 (Hanford 67)	39
2.4.3.3 Experimento de Hanford série 1983 (Hanford 83)	40
2.4.4 Experimento de Lillestrom.....	41
2.4.5 Experimento de Prairie Grass	42
2.5 REDES NEURAS ARTIFICIAIS.....	42
2.5.1 O emprego de redes neurais artificiais nas ciências atmosféricas	46
2.5.2 Aplicação de redes neurais em estudos de dispersão atmosférica.....	47
3 METODOLOGIA	52
3.1 SELEÇÃO DOS DADOS	52
3.2 VARIÁVEIS DE INTERESSE.....	54
3.3 CÁLCULO DAS VARIÁVEIS NÃO FORNECIDAS	55

3.4 SIMULAÇÕES NO MODELAR	57
3.5 TREINAMENTO E OPERAÇÃO DA REDE NEURAL ARTIFICIAL	57
3.6 ANÁLISE ESTATÍSTICA.....	62
3.7 EXPERIMENTOS COM A REDE NEURAL ARTIFICIAL	65
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	70
4.1 CASOS DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA ESTÁVEL.....	70
4.1.1 Casos de estabilidade atmosférica estável sem aplicação da transformação logarítmica.....	70
4.1.2 Casos de estabilidade atmosférica estável com a transformação logarítmica.....	72
4.2 CASOS DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA NEUTRA E INSTÁVEL	78
4.2.1 Casos de estabilidade atmosférica neutra e instável sem aplicação da transformada logarítmica.....	78
4.2.2 Casos de estabilidade atmosférica neutra e instável com a aplicação da transformada logarítmica.....	78
5 CONCLUSÃO	85
REFERÊNCIAS.....	88
APÊNDICE A – DIAGRAMAS DE DISPERSÃO PARA OS CASOS ESTÁVEIS (TESTE 06)	95
APÊNDICE B – DIAGRAMAS DE DISPERSÃO PARA O CONJUNTO DOS CASOS NEUTROS E INSTÁVEIS (TESTE 05).....	100

1 INTRODUÇÃO

A exposição à poluição atmosférica representa um risco para a saúde e para a qualidade de vida das pessoas, podendo, de acordo com diversos estudos, agravar casos de bronquite e asma; aumentar as admissões hospitalares; causar decaimento da função pulmonar; propiciar a formação de trombos no sistema circulatório que podem levar a infartos e derrames cerebrais; aumentar a incidência de casos de doença pulmonar obstrutiva, pneumonia e doenças cardiovasculares; provocar câncer de pulmão; acelerar a progressão de doenças neurodegenerativas e aumentar as taxas de mortandade e mortalidade (POPE *et al.*, 2002; GENC *et al.*, 2012; DOCKERY *et al.*, 1993; DOCKERY, POPE, 1994, EPA, 2009; WHO, 2005, BRAGA *et al.*, 2001). Desta maneira, é imperativo que a poluição atmosférica seja controlada e mantida dentro de limiares aceitáveis, a fim de proteger a população de seus efeitos deletérios.

Como as indústrias representam as fontes fixas de poluição do ar mais significativas ou de maior potencial poluidor (DERISIO, 2007), se faz necessário compreender o impacto de uma fonte deste tipo ao longo de sua vizinhança, bem como regular sua emissão de modo que não represente riscos à saúde e à qualidade de vida das pessoas. Para tanto, foram desenvolvidos modelos matemáticos que simulam o transporte de poluentes e que ajudam a melhor compreender os processos que ocorrem na atmosfera. No entanto, tais modelos ainda apresentam diversas fontes de erro que tornam seus resultados pouco precisos (FOX, 1984; HANNA, 1993). Em geral, tais modelos são baseados em deduções empíricas ou desenvolvidos para usos muito específicos e, portanto, não são robustos o suficiente para apresentar previsões acuradas. Para se ter uma ideia, um modelo pode ser considerado bom quando os resultados das concentrações previstas estão numa faixa entre metade e o dobro do valor real (CHANG, HANNA, 2004).

Em vista disso, tornou-se imprescindível a busca por formas de minimizar os erros, seja por meio de melhorias nas parametrizações, seja por meio de métodos computacionais mais sofisticados. Mais recentemente, tem-se empregado modelos mistos que unem os já tradicionais modelos de dispersão com abordagens

estatísticas (PELLICIONI, TIRABASSI, 2001a; PELLICIONI, GARIAZZO, TIRABASSI, 2004).

Dentre os métodos estatísticos, as redes neurais mostraram que são capazes de reproduzir problemas com alto grau de não-linearidade, apresentando bons resultados (HAYKIN, 1999). Além disso, já foram empregadas em problemas envolvendo as ciências atmosféricas (GARDNER, DORLING, 1998).

O presente trabalho se propõe a aplicar uma rede neural artificial do tipo *perceptron* multicamadas treinada por meio do algoritmo de *backpropagation* com o intuito de tornar mais acurados os resultados previstos pelo Sistema MODELAR.

O Sistema MODELAR, ou simplesmente MODELAR, é um modelo numérico, desenvolvido pelo LEMMA (Laboratório de Estudos em Monitoramento e Modelagem Ambiental da Universidade Federal do Paraná) com intuito de ser um candidato a modelo regulatório de qualidade do ar para ser usado dentro do Estado do Paraná nos processos de licitação e licença ambiental de indústrias de considerável potencial poluidor do ar. Tal modelo considera uma fonte de emissão fixa, elevada, pontual e contínua, ou seja, ele descreve a dispersão de uma pluma de poluentes emitida por uma chaminé.

Em um primeiro momento, o presente trabalho apresentará uma revisão bibliográfica (Capítulo 2) com o intuito de melhor situar o leitor acerca dos temas aqui abordados. Serão tratados assuntos como os modelos matemáticos de dispersão atmosférica (com destaque para o MODELAR), uma breve introdução ao conceito de estabilidade, os experimentos de dispersão atmosférica e as redes neurais artificiais citando o algoritmo de treinamento *backpropagation*, utilizado no treinamento das mesmas. Por fim, a seção 2.4.2 tratará de trabalhos análogos ao que aqui se apresenta, em que redes neurais artificiais foram aplicadas em associação a modelos de dispersão atmosférica.

O Capítulo 3 trata da metodologia empregada, primeiramente na seleção dos dados e cálculo das variáveis faltantes. Em seguida, aborda a realização das simulações com o MODELAR e o treinamento e operação da rede neural e, por fim, os procedimentos adotados para a realização das análises estatísticas. Os resultados obtidos comparando-se o desempenho das simulações realizadas

apenas pelo MODELAR com as que foram corrigidas pela rede neural artificial são apresentados e discutidos no Capítulo 4.

Finalmente, o Capítulo 5, apresenta as conclusões do estudo e as recomendações para trabalhos futuros.

1.1 OBJETIVO GERAL

O presente trabalho tem como objetivo utilizar as redes neurais artificiais como um pós-processamento a ser aplicado na correção dos resultados de concentração de poluição atmosférica ao nível do solo, oriundos de uma fonte pontual, elevada e contínua e simulados pelo modelo de dispersão atmosférica MODELAR.

Deverão ser utilizadas duas redes neurais do tipo *perceptron* multicamadas treinadas pelo algoritmo *backpropagation*, sendo uma especializada para os casos de atmosfera estável e outra especializada para o conjunto dos casos de atmosfera neutra e instável. Espera-se que o emprego das redes neurais melhore a acurácia dos resultados, tornando as previsões mais confiáveis. Diferentemente do que já foi realizado em outros estudos, espera-se também que, no presente projeto, a rede tenha um caráter mais generalista, ou seja, não deverá ser específica para um determinado local ou para os dados de um único experimento de campo.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Constituir uma base de dados com informações oriundas de experimentos de dispersão atmosférica, como dados de concentração de um elemento traçador e parâmetros micrometeorológicos, necessários para realizar as simulações no MODELAR

- Estabelecer a base de dados com tamanho suficiente para a realização de todas as fases necessárias à operação da rede neural: treinamento, teste e validação.
- Garantir que a rede possua um caráter menos especializado, sem ser restrita a uma determinada configuração atmosférica ou espacial, por meio de uma base de dados que contenha experimentos realizados em diversos locais e em diversas situações.
- Identificar quais variáveis, tanto para os casos de atmosfera estável quanto para o conjunto dos casos de atmosfera neutra e instável, devem ser utilizadas como dado de entrada da rede a fim de obter os melhores resultados.
- Definir para cada caso a melhor configuração da rede, ou seja, quantidade de neurônios na camada oculta
- Avaliar se o emprego da rede realmente é capaz de tornar mais acurados os resultados das simulações, ou seja, verificar se o uso da rede neural apresenta uma significativa melhora nos parâmetros estatísticos escolhidos para a avaliação da qualidade dos resultados.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 MODELOS MATEMÁTICOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA

Os modelos matemáticos buscam representar a realidade observada na natureza por meio de expressões matemáticas, ou seja, simulam processos que ocorrem na natureza e tentam obter uma solução que represente tal processo.

Quando se fala em modelos matemáticos de dispersão atmosférica estamos nos referindo a modelos dedicados a simular o comportamento de uma substância se dispersando na atmosfera. Estes modelos nos permitem prever o comportamento de uma determinada emissão sem que ela de fato ocorra, possibilitando assim avaliar os efeitos como se tal emissão fosse real. Dentre as diversas aplicações possíveis destacam-se: realizar estudos dos impactos ambientais de um empreendimento, fornecer uma análise técnica que possa embasar a concessão ou não do licenciamento ambiental, auxiliar no planejamento da ocupação e uso do solo, determinar as áreas que serão mais impactadas pela emissão e avaliar a eficiência das medidas de controle de poluição.

Dadas as aplicações supracitadas, os modelos de dispersão atmosférica são uma importante ferramenta de gestão ambiental e são amplamente empregados por agências ambientais no mundo todo.

A eficiência de um modelo de dispersão atmosférica está intimamente relacionada com as considerações e simplificações feitas, bem como com a representação de parâmetros e processos tais quais: a distribuição dos ventos, a turbulência, o relevo, as condições de emissão, a estabilidade atmosférica, entre outros. A escolha de qual modelo é mais adequado para solucionar determinado problema depende do que se pretende analisar e de fatores como: os dados disponíveis; as características da emissão; os padrões de circulação; o conhecimento acerca das cargas poluidoras; as condições químicas e biológicas do sistema; entre outros.

Os modelos de dispersão atmosférica se propõem a resolver a equação da advecção-difusão. Alguns optam por soluções analíticas, porém, devido à complexidade da equação, estas soluções dependem de uma série de simplificações que podem, por vezes, tornar a solução muito simplista ou aplicável apenas para casos específicos. Para sobrepujar as limitações das soluções analíticas, utilizam-se os métodos numéricos, capazes de obter soluções para casos mais complexos.

A equação da advecção-difusão simula dois fenômenos de transporte de massa de contaminante, como o próprio nome sugere, eles são: difusão e advecção. O primeiro se refere ao processo de mistura de propriedades de um fluido por meio de movimentos moleculares e turbulentos. O segundo se caracteriza pelo transporte de uma propriedade atmosférica devido exclusivamente à translação de porções do fluido, estando intimamente relacionado com o campo de velocidades (AMS, 2014)

O modelo pode considerar um poluente como conservativo quando este mantém sua massa total constante, excetuando-se os processos de diluição e advecção. Os poluentes não-conservativos, por sua vez, têm sua massa alterada por meio de processos físicos, químicos e/ou biológicos. Outra consideração que pode ser feita em relação ao poluente é se ele é passivo ou ativo. No caso do poluente passivo, sua presença na atmosfera não afeta o padrão de circulação e, nesse caso, a modelagem do transporte do poluente é independente da modelagem da circulação. Já o poluente ativo interfere na circulação e a modelagem de ambos deve ser feita de maneira conjunta.

Existe uma infinidade de classificações e características que podem ser levadas em consideração quando se desenvolve ou se utiliza um determinado modelo. Arya (1999) destaca algumas das classificações mais utilizadas quando tratamos de modelos de dispersão atmosférica. Segundo o autor, podemos ter três tipos de emissão: a emissão instantânea (que ocorre em um determinado momento e depois é interrompida, como no caso de uma explosão); a emissão intermitente e a emissão contínua. A geometria da fonte também influencia os processos de dispersão e de transporte advectivo. A fonte pode ser pontual como uma chaminé, linear como uma rua ou de área como um campo com pesticida ou uma mata sendo queimada. Ainda segundo o autor, podemos classificar de acordo com a localização da fonte: pode estar ao nível do solo, como uma queimada ou um automóvel; pode

ser elevada e dentro da camada limite planetária, como no caso das chaminés; ou ainda pode estar na atmosfera livre, como no caso dos aviões.

Derísio (2007) classifica as fontes de poluição atmosférica em dois grandes grupos: móveis e fixas ou estacionárias. Dentre as fontes fixas, a indústria é a mais significativa ou de maior potencial poluidor; dentre as fontes móveis, temos os automóveis, motos, trens, aviões e embarcações marinhas.

O modelo matemático utilizado no presente trabalho considera a fonte como sendo fixa, pontual e contínua. Ou seja, o modelo foi estruturado com o objetivo de representar fontes como chaminés que, ao emitir poluentes de forma contínua, dão origem à chamada pluma de poluentes.

Quando um modelo numérico de dispersão é desenvolvido, ele deve passar por um processo de validação para que se possa averiguar a eficiência e acurácia do mesmo. Para tanto, comparam-se dados de experimentos de campo com os resultados fornecidos pelo modelo. No caso de modelos de dispersão atmosférica desenvolvidos para fins regulatórios, em geral, é preciso conhecer a concentração de um determinado poluente ou traçador a uma determinada distância da fonte, as condições meteorológicas e de lançamento no momento da emissão.

2.1.1 Incertezas nos modelos de dispersão atmosférica

Os modelos de dispersão atmosférica são ferramentas sofisticadas que frequentemente refletem os mais avançados conhecimentos acerca dos fenômenos de transporte e da turbulência atmosférica. Contudo, seus resultados ainda apresentam erros significativos.

Tais modelos são desenvolvidos para condições específicas que nem sempre retratam com clareza e precisão necessárias todos os fatores envolvidos. A qualidade dos resultados é altamente dependente da boa concordância entre as hipóteses que embasam a formulação do modelo e as condições físicas reais em que ocorre o fenômeno. Dentro de uma ampla gama de fatores que contribui para a presença de erro nos resultados modelados, a variabilidade intrínseca da atmosfera

é um dos elementos de maior importância. O processo de dispersão é regido principalmente pela turbulência presente na camada limite atmosférica. Contudo, tal turbulência é estocástica por natureza e, sendo assim, é descrita por meio de propriedades estatísticas tais como média e variância, portanto, não pode ser prevista ou descrita de forma determinística.

Em 1982, um grupo de cientistas se reuniu em um *workshop* sobre a quantificação e a comunicação de incertezas em modelos (*Workshop on Quantifying and Communicating Model Uncertainty*), promovido pela Sociedade Americana de Meteorologia (AMS), para discutir as incertezas características dos modelos de qualidade do ar. Eles concordaram que há duas classes fundamentais de erro. A primeira se refere aos erros que podem ser reduzidos. Este tipo de erro é decorrente principalmente de imprecisões do modelo e de dados inadequados, tanto meteorológicos quanto de qualidade do ar. Já a segunda se refere às incertezas inerentes ao problema e tem sua origem na natureza estocástica da turbulência atmosférica (FOX, 1984).

Hanna (1993), ao comparar o desempenho de diversos modelos com várias bases de dados, conclui que as magnitudes das incertezas dos modelos estudados são similares. Aparentemente, quando um modelo alcança um patamar em que o erro quadrático médio normalizado e o desvio fracional das concentrações observadas e previstas são de 70% e $\pm 20\%$, respectivamente, torna-se muito difícil que os novos modelos apresentem um desempenho estatístico significativamente melhor. O autor atribui esta irreduzibilidade do erro a dois fatores: a característica estocástica do problema e possíveis erros nos dados. O autor ainda destaca que utilizar apenas dados de um experimento de campo para a validação de um modelo pode ser tendencioso, tendo em vista que não é incomum que o mesmo modelo superestime em 40% as concentrações de um determinado experimento e subestime, também em torno de 40%, os dados de um experimento realizado em outro local.

Olesen (2001) realizou uma revisão acerca do desempenho de diversos modelos de dispersão e observou que para os melhores modelos o desvio relativo médio é tipicamente na ordem de $\pm 40\%$ e que a dispersão aleatória dos dados corresponde a um fator de dois da média. Por sua vez, Chang *et al.* (2003) ao avaliarem modelos de mesoescala, observaram que os melhores resultados

apresentam um viés médio de $\pm 35\%$ e que a percentagem de dados que ficam dentro dos limites estabelecidos pelo fator de dois é entre 40 e 60%.

Os modelos gaussianos, amplamente utilizados no estudo da dispersão atmosférica, se alicerçam na hipótese de que o transporte do poluente ocorre em um meio com turbulência homogênea e estacionária. Contudo, esta suposição em geral não corresponde à realidade já que os relevos irregulares tornam a turbulência não homogênea.

Em geral, no caso das emissões contínuas, considera-se a emissão estacionária, o que nem sempre é realista tendo em vista que as características das emissões, em especial a taxa de emissão, podem variar com a temperatura, com a qualidade da mistura combustível/comburente, com o tipo e a qualidade do combustível, entre outros fatores.

Há também uma grande dificuldade de representar matematicamente fatores ligados à topografia do terreno e suas conseqüentes interferências nos processos de dispersão. Isto ocorre principalmente porque essas características são muito peculiares do local em questão, não havendo assim uma maneira eficiente e unificada de reproduzi-las.

Como já citado, as incertezas presentes nos dados obtidos por meio dos experimentos de campo também podem representar uma importante fonte de erro. Algumas destas incertezas que podem se tornar significativas são: os problemas e erros durante a amostragem, as incertezas do método de análise dos mostradores, as dificuldades com a topografia, as limitações dos equipamentos de medição e o uso de dados não representativos.

2.2 MODELAR

O Sistema Modelar foi desenvolvido pelo Lemma (Laboratório de Estudos em Monitoramento e Modelagem Ambiental da Universidade Federal do Paraná) com o propósito de atender aos requisitos para ser um candidato a modelo regulatório de qualidade do ar para o Estado do Paraná, podendo ser utilizado nos

processos de licenciamento ambiental de indústrias de considerável potencial poluidor do ar.

Atualmente, o modelo conta com uma base de dados micrometeorológicos, um modelo numérico de dispersão de poluentes atmosféricos e uma interface gráfica amigável que facilita o seu uso.

A base de dados micrometeorológicos reúne informações climatológicas do Estado do Paraná e foi desenvolvida utilizando-se da regionalização dinâmica de dados do Projeto Reanalysis (KISTLER *et al.*, 2001). O modelo numérico de dispersão (que será melhor detalhado adiante) simula o transporte advectivo-difusivo de um contaminante passivo e conservativo emitido por uma fonte fixa, pontual e contínua. A interface gráfica permite ao usuário definir os dados a serem utilizados, gerenciar a operação do modelo e organizar os resultados de forma simples, sem a necessidade de alterar o código do programa.

O MODELAR utiliza um modelo euleriano bidimensional estacionário de dispersão atmosférica para simular o transporte advectivo-difusivo de um contaminante. A tridimensionalidade do modelo decorre da aplicação de uma dispersão lateral gaussiana ao resultado obtido pelo modelo bidimensional. O transporte dos poluentes é descrito com base na geração de turbulência por meio de efeitos térmicos e mecânicos e o sistema de coordenadas é definido de tal forma que o eixo x coincide com a direção do vento médio e o eixo z corresponde ao eixo vertical (LEMMA, 2011).

A solução numérica utiliza um método trapezoidal implícito que permite um espaçamento relativamente grande ao longo do eixo x . Enquanto os pontos de grade ao longo do eixo x são distribuídos de forma uniforme, os pontos do eixo vertical são distribuídos de tal maneira que o espaçamento próximo à superfície, onde ocorrem os maiores gradientes de velocidade e concentração, seja menor. Porém, as resoluções das grades horizontais e verticais do programa podem ser alteradas pelos usuários de acordo com a necessidade e o problema em questão. A solução é calculada por colunas por meio do Método de Gauss-Seidel. De acordo com o critério de parada definido, o erro relativo da concentração entre iterações deve ser menor que 10^{-10} (ARMANI *et al.*, 2014).

A equação da advecção-difusão considerando um sistema de coordenadas cartesianas pode ser escrita como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U(z) \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \pm S \quad (1)$$

em que $C(x, y, z, t)$ é a concentração média do escalar de interesse, $U(z)$ é a velocidade média do vento na direção x e K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta nas direções longitudinal, transversal e vertical, respectivamente. As reações químicas que podem alterar a concentração do escalar de interesse são representadas pelo termo S .

O MODELAR resolve a equação acima considerando algumas simplificações. Primeiramente, o modelo assume que o poluente é conservativo, portanto, S é nulo. Em seguida, assume-se que o problema é estacionário, ou seja, não há variação na concentração emitida ao longo do tempo, o que implica que $\partial C / \partial t = 0$. Por fim, desprezamos a difusão longitudinal e transversal.

Aplicando as simplificações acima e integrando a Equação 1 na direção transversal temos:

$$U(z) \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) \quad (2)$$

em que $\bar{C}(x, z)$ é a concentração média integrada na direção normal ao vento (y).

Como condições de contorno, consideramos os fluxos como sendo nulos na superfície e no topo da camada limite atmosférica, de forma que:

$$K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = z_0 \quad \text{e} \quad z = hbl \quad (3)$$

sendo z_0 a altura de rugosidade aerodinâmica e hbl a espessura da camada limite atmosférica.

Outra condição a ser estabelecida é a de fonte pontual. Esta condição de fronteira ocorre no ponto de lançamento ($x = 0$), na altura $z = H_s$ e é dada por:

$$U(z)\bar{C}(x = 0, z) = Q\delta(z - H_s) \quad (4)$$

em que Q é a taxa de emissão da fonte, δ é a função Delta de Dirac e H_s é a altura da fonte.

Uma vez que se determinou a distribuição longitudinal da concentração integrada, é possível obter a distribuição lateral da concentração na superfície assumindo uma distribuição Gaussiana (GRYNING *et al.*, 1987) da seguinte forma:

$$C(x, y, 0) = \frac{\bar{C}(x, 0)}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_y} \exp\left\{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right\} \quad (5)$$

onde $C(x, y, 0)$ é a concentração no nível da superfície e no ponto (x, y) , $\bar{C}(x, 0)$ é a concentração integrada na direção transversal ao vento no nível da superfície, σ_y é o parâmetro que caracteriza o espalhamento da pluma na direção transversal ao vento e y é a distância na direção transversal.

O MODELAR se baseia na formulação apresentada por Arya (1988) para estimar o perfil vertical da velocidade do vento, definindo-o como:

$$U(z) = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \Psi_m\left(\frac{z}{L}\right) \right], \quad z \leq z_b \quad (6)$$

$$U(z) = U(z_b), \quad z > z_b \quad (7)$$

$$z_b = \min[|L|; 0,1h] \quad (8)$$

onde u_* é a velocidade de atrito, κ é a constante de von Karman ($\kappa = 0,41$), L é o comprimento de Monin-Obukhov, Ψ_m é a função de similaridade para o perfil do

vento. O comprimento de Monin-Obukhov representa a altura a partir da superfície em que os efeitos mecânicos predominam sobre os efeitos térmicos na geração de turbulência e é expresso por:

$$L = \frac{-u_*^3 c_p \rho \theta_v}{\kappa g H_0} \quad (9)$$

em que c_p é o calor específico do ar a pressão constante, ρ é a densidade do ar, θ_v é a temperatura potencial virtual, g é a aceleração da gravidade, H_0 é o fluxo vertical de calor turbulento na superfície que pode ser determinado a partir da seguinte equação:

$$H_0 = c_p \overline{w\theta_0} \quad (10)$$

em que $\overline{w\theta_0}$ é a covariância entre as flutuações da componente w da velocidade e da temperatura potencial em z_0 , que representa o fluxo de calor na superfície.

A velocidade de atrito é definida como:

$$u_* = \left(\frac{\tau_0}{\rho} \right)^{1/2} \quad (11)$$

em que τ_0 é o fluxo vertical turbulento de quantidade de movimento que pode ser determinado por:

$$\tau_0 = -\rho \overline{uw} \quad (12)$$

sendo \overline{uw} a covariância das flutuações das componentes de velocidade u e w .

A função de estabilidade de quantidade de movimento (utilizada para obter o perfil de velocidade) foi definida de acordo com a usada por Arya (1988):

$$\Psi_m = -\frac{5z}{L}, \quad \text{para } \frac{z}{L} \geq 0 \quad (13)$$

$$\Psi_m = \ln \left[\left(\frac{1+a^2}{2} \right) \left(\frac{1+a}{2} \right)^2 \right] - 2 \tan^{-1} a + \frac{\pi}{2}, \quad \text{para } \frac{z}{L} < 0 \quad (14)$$

com

$$a = \left(1 - \frac{15z}{L} \right)^{1/4} \quad (15)$$

Foram adotadas duas metodologias distintas para determinar o coeficiente de difusividade turbulenta vertical de acordo com as condições de estabilidade atmosférica. Nos casos em que $L < 0$, adotou-se o modelo proposto por Degrazia *et al.* (1997):

$$K_z = 0,22 w_* h \left(\frac{z}{h} \right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1/3} \left[1 - \exp \left(-\frac{4z}{h} \right) - 0,0003 \exp \left(\frac{8z}{h} \right) \right] \quad (16)$$

em que w_* é a escala da velocidade convectiva dada por:

$$w_* = \left(\frac{g}{\Theta_v} \overline{w\theta_v}|_0 h \right)^{1/3} \quad (17)$$

na qual $\overline{\Theta_v}$ representa a temperatura potencial virtual média e $\overline{w\theta_v}|_0$ a covariância entre as flutuações na superfície da componente w da velocidade e da temperatura potencial virtual, ou seja, representa o fluxo cinemático de calor sensível virtual na superfície.

Já no caso em que $L \geq 0$ utilizou-se parametrização sugerida por Degrazia *et al.* (2000):

$$K_z = \frac{0,4 \left(1 + \frac{3,7z}{\Lambda}\right)^{\frac{1}{3}} u_{*z}}{\left(1 + \frac{15fz}{u_{*0}} + \frac{3,7z}{\Lambda}\right)^{\frac{4}{3}}} \quad (18)$$

em que f é o parâmetro de Coriolis ($f = 10^{-4} s^{-1}$), Λ é o comprimento local de Monin-Obukhov dado por:

$$\Lambda(z) = L \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1,5\alpha_1 - \alpha_2} \quad (19)$$

em que, para condições estáveis, $\alpha_1 = 1,5$ e $\alpha_2 = 1,0$. Temos ainda a escala local de velocidade dada por:

$$u_*^2(z) = u_{*0}^2 \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\alpha_3} \quad (20)$$

na qual u_{*0} é a velocidade de atrito na superfície e $\alpha_3 = 1,5$.

O MODELAR foi validado considerando como referência dois experimentos de campo. São eles: o Experimento de Copenhagen (GRYNING, 1981; GRYNING, LYCK, 2002) e o Projeto Prairie Grass (BARAD, 1958). Em ambas as análises, o modelo apresentou um bom desempenho (LEMMA, 2011). Utilizando os dados do Projeto Prairie Grass, Armani *et al.* (2014) compararam o desempenho do MODELAR e do AERMOD, chegando à conclusão de que eles são estatisticamente comparáveis.

2.3 ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA

O termo estabilidade atmosférica é presença constante em estudos de caráter meteorológico e representa um elemento importante na compreensão do comportamento e das características da atmosfera, haja vista que está intrinsicamente relacionado com a geração e manutenção da turbulência. Porém, há uma diversidade de maneiras de representar tal estabilidade, seja por meio da estabilidade estática, da dinâmica ou da estabilidade não-local.

A estabilidade estática, também chamada de estabilidade hidrostática, refere-se a uma força resistiva oriunda da estrutura vertical da densidade atmosférica dentro do campo gravitacional, sobretudo nos casos de equilíbrio hidrostático (GATES, 1961). Em outras palavras, as variações de temperatura e umidade específica de acordo com a altitude acarretam variações verticais de densidade, havendo então uma estratificação atmosférica. Ao considerarmos uma parcela de ar que esteja em movimento ascendente ou descendente em dito ambiente estratificado, uma força ou aceleração denominada flutuabilidade, que é altamente dependente da diferença de densidade entre a parcela de ar e o ambiente para o qual a mesma foi deslocada, agiria sobre tal parcela. Caso esta força aja no sentido de trazer a parcela de ar de volta à sua posição inicial de equilíbrio, diz-se que a atmosfera encontra-se estaticamente estável. Por sua vez, caso a flutuabilidade atue amplificando os efeitos do deslocamento e com isso levando a parcela de ar para uma posição cada vez mais distante da sua posição de equilíbrio, caracteriza-se uma atmosfera estaticamente instável. Por fim, considera-se a atmosfera como neutra caso não haja nenhuma flutuabilidade agindo sobre a parcela de ar (ARYA, 1999; WALLACE, HOBBS, 2006).

A estabilidade dinâmica, ao contrário do que ocorre no caso da estabilidade estática, apresenta dependência do comportamento dos ventos. Assim, mesmo que o ar se encontre em estabilidade estática, o cisalhamento do vento é capaz de gerar turbulência. Se um escoamento inicialmente laminar atinge um ponto crítico de cisalhamento passa a apresentar instabilidade dinâmica e ondas suaves passam a se formar na interface. As ondas, denominadas de ondas Kelvin-Helmholtz, começam a crescer em amplitude, eventualmente chegando ao ponto em que

passam a quebrar e envolver a si mesmas como um vórtice. No interior de cada onda colapsada, há uma porção de fluido mais leve que foi envolvido por uma camada mais densa propiciando o aparecimento de instabilidade estática em algumas regiões específicas. Essa combinação de instabilidade estática e dinâmica faz com que as ondas passem a ser turbulentas e tal turbulência se difunde misturando os fluidos. Durante este processo de difusão, há transferência de quantidade de movimento entre os fluidos reduzindo o cisalhamento entre as camadas. A interface que antes era bem definida passa a ficar mais ampla, com estabilidade estática e com menor cisalhamento. A mistura entre os fluidos pode reduzir o cisalhamento até um determinado valor crítico no qual a instabilidade dinâmica é eliminada e, na falta de uma força agindo continuamente no intuito de restaurar o cisalhamento, a turbulência na interface se enfraquece e o escoamento pode voltar a ser laminar (STULL, 1988). Para melhor ilustrar este processo, temos a Figura 1 que retrata experimentos realizados em laboratório e que permitem a observação desse fenômeno. Na imagem temos uma camada de água, em branco, escoando para a direita sobre uma camada de salmoura tingida (representada pela cor preta), mais densa, que escoar para a esquerda.

No caso de estabilidade estática, a flutuabilidade pode agir reduzindo a energia cinética turbulenta, convertendo-a em energia potencial. Tal processo ocorre pela movimentação ascendente do ar mais frio e pela movimentação descendente do ar quente. Nessas situações, a existência de turbulência depende da relação de forças entre a geração mecânica (M) por meio do cisalhamento do vento se contrapondo ao consumo promovido pela flutuabilidade (B) (WALLACE, HOBBS, 2006). A razão entre esses dois termos define o número adimensional de Richardson (R_i) e podem ser aproximados pelos gradientes verticais do vento e temperatura potencial conforme a equação abaixo. No caso de instabilidade estática, como o numerador é negativo ($\partial\bar{\theta}_v/\partial z < 0$), haverá instabilidade dinâmica independente da razão entre geração mecânica e consumo por flutuabilidade.

$$R_i = \frac{-B}{M} = \frac{\frac{g}{\bar{\theta}_v} \frac{\partial\bar{\theta}_v}{\partial z}}{\left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial\bar{v}}{\partial z}\right)^2} \quad (21)$$

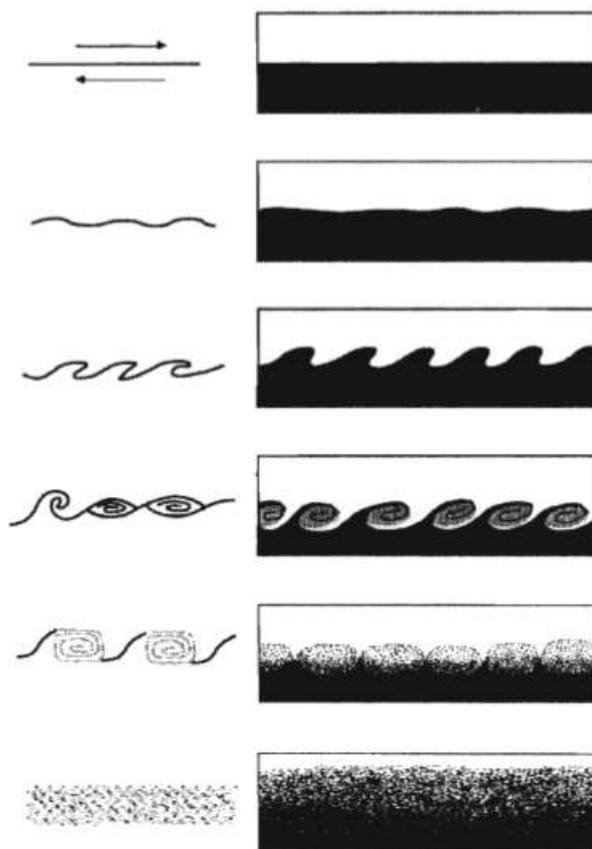


Figura 1 - Diagrama ilustrando o aparecimento de instabilidade dinâmica e turbulência por meio de ondas de Kelvin-Helmholtz

FONTE: STULL, 1988.

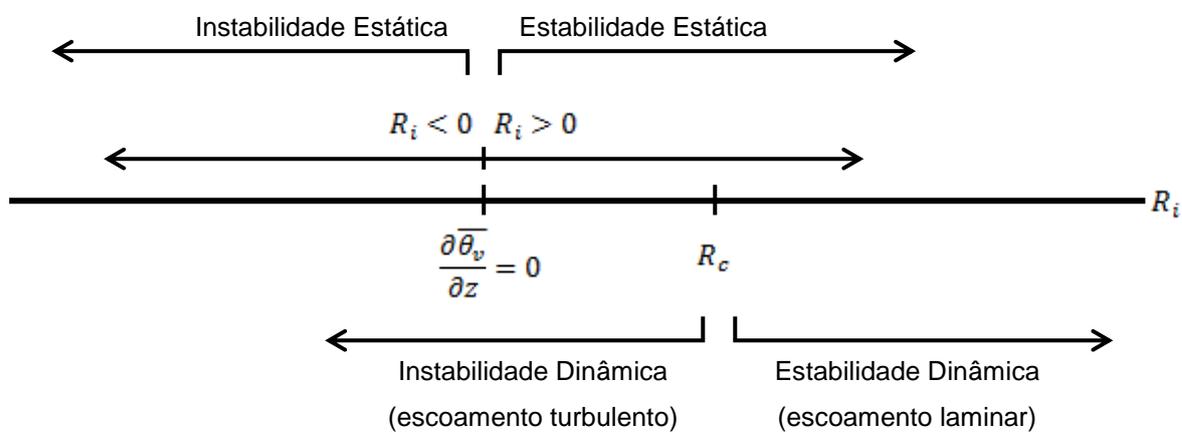


Figura 2 - Relações entre estabilidade estática e dinâmica e o número de Richardson

Acredita-se que um escoamento laminar se torna instável quando R_i é menor que um dado valor crítico (R_c) e que o fim da turbulência ocorre em um dado valor denominado R_t . Então o escoamento laminar se torna turbulento quando $R_i < R_c$ e um escoamento turbulento se torna laminar quando $R_i > R_t$. Não há um consenso acerca dos valores exatos, mas costuma-se adotar $0,21 \leq R_c \leq 0,25$ e $R_t = 1,0$. A Figura 2 ilustra a relação entre estabilidade estática e dinâmica e o número de Richardson.

Outro parâmetro de turbulência amplamente empregado é o comprimento de Monin-Obukhov (L), derivado da teoria de similaridade. Tal parâmetro é válido na camada superficial em que os fluxos turbulentos variam menos de 10% em sua magnitude com a altura. Na camada mais próxima da superfície até a altura descrita por L , os efeitos da turbulência mecânica são predominantes. Por sua vez, em alturas mais elevadas, os efeitos da turbulência térmica se sobrepõem aos da turbulência mecânica. A equação que define o comprimento de Monin-Obukhov já foi apresentada na seção anterior, quando da definição das variáveis de importância para o MODELAR (Equação 9). A relação entre uma dada altura acima da superfície (z) e o comprimento de Monin-Obukhov (L) é conhecida como parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov (ζ).

$$\zeta = z/L \quad (22)$$

Apesar de sua magnitude não estar diretamente relacionada com estabilidade estática ou dinâmica, o sinal de ζ indica a condição de estabilidade estática. De maneira geral, quando ζ é negativo, considera-se como instável e quando positivo, como estável. Assim como no caso do número de Richardson, o parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov expressa a relação entre os efeitos da flutuabilidade e do cisalhamento. De acordo com a teoria de similaridade de Monin-Obukhov, os gradientes de velocidade do vento, a temperatura potencial e outras variáveis da camada superficial podem ser descritas como funções de ζ (STULL, 1988; ARYA, 1999).

No presente trabalho, os dados oriundos dos experimentos de dispersão serão classificados em três possíveis cenários de estabilidade atmosférica de acordo com o parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov. Assim, quando $z/L > 1$ a condição de estabilidade atmosférica será considerada como estável, para $-1 \leq z/L \leq 1$ como neutra e quando $z/L < -1$ será considerada como instável (ARYA, 1999).

2.4 EXPERIMENTOS DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA

Os experimentos de dispersão foram desenvolvidos com o intuito de ajudar a ampliar o conhecimento acerca dos fenômenos de transporte de contaminantes na atmosfera. A partir desses experimentos, pode-se, por exemplo, validar as deduções empíricas consolidando assim os trabalhos teóricos.

No caso dos experimentos atmosféricos, é comum a utilização de traçadores liberados sob condições controladas e que possibilitem a realização de medidas de concentração em diferentes pontos no espaço. Os dados obtidos nesses experimentos são de grande importância na validação de modelos e na determinação de parâmetros de dispersão de modelos semi-empíricos.

Vanderborght e Kretzschmar (1984) separam as publicações científicas referentes aos experimentos de dispersão atmosférica em quatro categorias:

(i) experimental: artigos que descrevem possibilidades de diferentes traçadores atmosféricos;

(ii) experimentos qualitativos com traçadores: experimentos nos quais um traçador é liberado na atmosfera e medições no sentido do vento são realizadas, porém sem o intuito de descrever quantitativamente a dispersão;

(iii) determinação de parâmetros de dispersão: a emissão de traçadores é realizada com a intenção de determinar parâmetros de dispersão a serem utilizados nos cálculos do modelo a ser empregado;

(iv) validação de modelos matemáticos: os dados obtidos por meio de experimentos com traçadores são comparados com os cálculos realizados pelo modelo em questão.

Os autores ainda afirmam que é vantajoso o uso de experimentos com traçadores na validação de modelos de dispersão, tendo em vista o conhecimento mais acurado das condições de emissão e a possibilidade de escolher a melhor configuração possível da rede de amostragem.

No caso do presente trabalho, os experimentos de interesse (detalhados nas próximas sessões) são os de dispersão atmosférica com traçadores para validação de modelos matemáticos cuja fonte seja pontual e a emissão contínua. De maneira geral, tais experimentos possuem uma configuração bastante semelhante, são constituídos de uma fonte de emissão rodeada por arcos de amostradores dispostos no sentido da pluma de emissão, como ilustra a Figura 3.

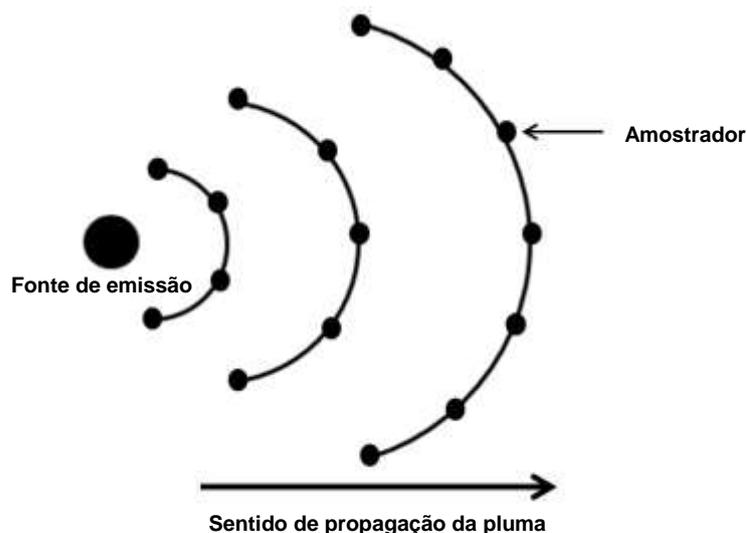


Figura 3 - Modelo genérico de um experimento de dispersão atmosférica com traçador

FONTE: A autora (2014)

Para facilitar o entendimento, adotaremos a seguinte convenção de termos: *observação* passa a se referir à concentração integrada observada ou aferida em cada arco de amostradores; *rodada* designa cada episódio em que há emissão de traçador e coleta de amostras; *experimento* se refere a todo o conjunto de práticas

realizadas, incluindo-se aí as diversas rodadas. Assim, um determinado experimento passa a ser composto por várias rodadas e uma mesma rodada pode ter tantas observações quantos forem os arcos de amostragem utilizados.

Muitos dos experimentos de dispersão foram realizados entre as décadas de 1950 e 1980. Sendo assim, sua documentação original é datilografada e, infelizmente, boa parte dos dados não foi digitalizada o que dificulta muito o acesso a essas informações.

2.4.1 Experimento de Copenhagen

O Experimento de Copenhagen foi realizado entre os anos 1978 e 1979 nos arredores da cidade de Copenhagen, na Dinamarca. Inicialmente, foi publicado um extenso relatório detalhando as técnicas de amostragem, o embasamento científico do experimento e os dados obtidos (GRYNING, 1981). Em 2002, Gryning e Lyck publicaram um novo relatório mais focado nos resultados e contendo apenas as informações básicas acerca dos aspectos técnicos e científicos envolvidos. Esse novo relatório apresentou uma versão estendida das medições de parâmetros meteorológicos realizadas na torre de emissão do traçador.

Para a realização do experimento, foi montado um sistema de emissão de hexafluoreto de enxofre (SF_6) numa torre de televisão, em Gladsaxe (cidade vizinha a Copenhagen). As taxas de emissão foram constantes ao longo de um período de amostragem, mas variavam entre 1,9 e 4,7 g/s de acordo com o dia em que o experimento foi realizado. A altura de emissão foi de 115 m, a área do experimento era predominantemente residencial, caracterizada por uma altura de rugosidade aerodinâmica média de 0,6 m. As amostragens, para determinar a concentração do traçador, foram realizadas entre 2 e 3 m acima do nível do solo, em três arcos aproximadamente circulares distando radialmente da torre de emissão cerca de 2, 4 e 6 km (GRYNING, 1981). A Figura 4 apresenta um esquema demonstrativo do Experimento de Copenhagen em que o ponto central no qual se lê “TV-TOWER”

corresponde ao ponto de emissão e os demais pontos dispostos em arcos representam os amostradores e sua distribuição geográfica.

Os dados meteorológicos foram medidos na torre de emissão. Foram realizadas medidas de: velocidade do vento a 10, 60, 120 e 200 m acima do nível do solo em intervalos de 10 minutos; direção do vento a 10, 120, 200 m acima do nível do solo, também em intervalos de 10 minutos; temperatura a 2, 40, 80, 120, 160, 200 m acima do nível do solo durante 10 segundos, a cada 10 minutos. No ponto de lançamento (115 m) foram realizadas medições tridimensionais de flutuações turbulentas de velocidade do vento. A altura da camada limite foi determinada a partir de radiossondagens diárias que foram realizadas próximas ao local do experimento (GRYNING, 1981; GRYNING, LYCK; 1984).

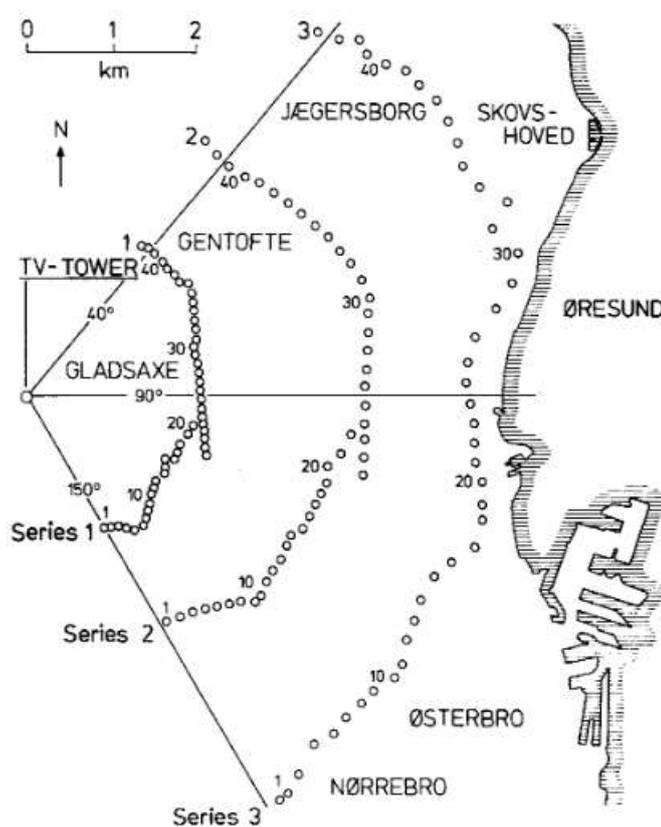


Figura 4 - Esquema demonstrativo do Experimento de Copenhague

FONTE: Gryning (1981).

2.4.2 Experimento de Cabauw

O Experimento de Cabauw foi realizado entre 28 de abril de 1977 e 31 de outubro de 1978, na cidade de Cabauw na Holanda. A fonte de emissão foi instalada no mastro meteorológico da cidade. O relatório com todos os procedimentos executados e os dados obtidos foi publicado por Agterberg *et al.* (1983). A substância traçadora utilizada foi o hexafluoreto de enxofre (SF_6) e as alturas de emissão variaram de acordo com o experimento (a 80 ou 200 m do nível do solo). As medidas de concentração ocorreram ao longo de um arco de amostradores distante cerca de 4 km da fonte e dispostos próximos ao nível do solo.

Foi realizada uma vasta quantidade de medidas de características meteorológicas como: o perfil do vento (com velocidades medidas a 1,5; 5; 10; 20; 40; 80; 120; 160 e 200 m acima do nível do solo); direção do vento (com medidas realizadas a 20; 40; 80; 120; 160; 200 m acima do nível do solo); temperatura do ar (com medidas realizadas a 0,6; 2; 5; 10; 20; 40; 80; 120; 160; 200 e 213 m acima do nível do solo) e variáveis micrometeorológicas. O relatório traz também informações de medidas de turbulência com desvio padrão da flutuação da velocidade do vento horizontal, desvio padrão da flutuação na direção do vento horizontal, desvio padrão da flutuação do vento vertical e com desvio padrão da flutuação de temperatura, cisalhamento do vento horizontal, direção do cisalhamento do vento horizontal e os fluxos vertical e horizontal turbulentos de temperatura. Quando as condições de visibilidade eram boas, duas radiossondagens foram realizadas (uma antes e outra depois da emissão do traçador) para obter informações meteorológicas acima do nível da torre. Há ainda observações da altura da camada limite (até 500 m) realizada por sonda acústica, medidas de radiação a 2 m do nível do solo e observações sinóticas (AGTERBERG, 1983).

2.4.3 Os Experimentos de Hanford

Os experimentos que ficaram conhecidos como Experimentos de Hanford foram realizados em uma área militar de cerca de 1517 km² conhecida como *Hanford Site*, localizada às margens do Rio Columbia, na região sudeste do estado de Washington (EUA). Esse sítio foi amplamente utilizado pelo governo norte americano para realizações de pesquisa, em especial para fins militares, sendo criado durante a Segunda Guerra Mundial como parte do Projeto Manhattan (projeto norte-americano responsável por desenvolver a bomba atômica). Durante a Segunda Guerra Mundial e a Guerra Fria, o local produziu plutônio e abrigou um total de nove reatores nucleares. Foi desse sítio que saiu o plutônio utilizado na primeira bomba atômica detonada em Nagasaki (Japão). Em 1989, a produção nuclear foi interrompida e deu lugar a um intenso processo de limpeza ambiental (DOE, 2014; EPA, 2014)

Dentre a ampla gama de experimentos científicos realizados em Hanford, temos diversos experimentos de dispersão com emissão de traçadores. Neles as alturas de emissão variavam de acordo com cada experimento em particular. Os amostradores, dispostos em forma de arco, eram posicionados a cerca de 1,5 m acima do solo e os arcos distavam 0,1; 0,2; 0,4; 0,8; 1,2; 1,6; 2,2; 3,2; 5,0; 7,0 e 12,8 km da fonte, sendo que nem sempre todos os arcos eram utilizados. Nesses experimentos, foram empregados seis diferentes tipos de traçadores: sulfeto de zinco (ZnS), fluoresceína, rodamina-B, criptônio-85, hexafluoreto de enxofre (SF₆) e xênon-133. Características meteorológicas como temperatura, velocidade do vento e direção do vento também foram medidas (RAMSDELL *et al.*, 1985).

Os experimentos realizados foram separados em séries que identificam grupos de experimentos com objetivos e características semelhantes. As séries de interesse para o presente trabalho serão detalhadas nas próximas seções.

2.4.3.1 Experimento de Hanford série 1964 (Hanford 64)

Durante o ano de 1964, um conjunto de 15 experimentos (S1 até S15) realizados em Hanford no período noturno ficou conhecido como Hanford 64 ou série S. Foram publicados 14 dos 15 experimentos já que o experimento S3 foi considerado insatisfatório, tendo em vista que uma mudança nos ventos acarretou em transporte do traçador para fora da área de amostragem (DROPPO *et al.*, 1985).

As emissões foram realizadas com o intuito de estudar a dispersão em condições de estabilidade atmosférica. O traçador utilizado foi o sulfeto de zinco (ZnS), lançado nos 11 primeiros experimentos a 56 m acima do nível do solo e nos últimos 3 experimentos a 111 m. A amostragem horizontal ocorreu a 1,5 m da superfície em arcos distantes 0,2; 0,8; 1,6; 3,2; 7,0 e 12,8 km do ponto de emissão, porém nem todos os arcos foram usados em todos os experimentos. Algumas amostragens verticais foram realizadas em 5 mastros dispostos nos primeiros 4 arcos, cujas alturas de amostragem variaram entre 27 m e 62 m acima do nível do solo. Velocidade e direção do vento, desvio padrão da direção horizontal do vento e temperatura também foram medidos (GLANTZ, WOODRUFF, DROPPO, 1985 *apud* DROPPO *et al.*, 1985; IRWIN, 2014).

2.4.3.2 Experimento de Hanford série 1967 (Hanford 67)

Nickola (1977) publicou uma compilação que abrange experimentos realizados entre julho de 1967 e novembro de 1973 e que passou a ser chamada de Hanford 67 ou série 67. Foram 103 emissões de traçadores durante 54 experimentos diferentes com diversas configurações. Os traçadores utilizados foram o sulfeto de zinco, fluoresceína, rodamina-B e criptônio-85. Em alguns experimentos foram realizadas emissões simultâneas de dois traçadores. As amostragens foram realizadas a 1,5m da superfície e, em todos os casos, o perfil de velocidade do vento, a direção do vento e a temperatura foram medidos. Os experimentos

presentes no relatório em questão correspondem às séries: D1 até D4, C1 até C5, U56 até U92 e V1 até V8.

Durante a série D foram utilizados dois traçadores simultaneamente, sulfeto de zinco e fluoresceína, ambos liberados a 2 m do chão. Os pontos de amostragem utilizados variavam entre 0,2 e 3,2 km de distância da fonte de emissão.

A série C foi caracterizada pela emissão de criptônio-85 a 1 m do solo com observações a 0,2 km e 0,8 km da fonte. No caso específico do experimento C5 foi liberado simultaneamente o traçador sulfeto de zinco a 2 m de altura com observações também realizadas a 0,2 km e 0,8 km da fonte.

A série U possui características mais heterogêneas. Em U56 até U58, sulfeto de zinco foi liberado a 2 m, enquanto a fluoresceína foi liberada a 26 m do solo. Entre U59 e U70, sulfeto de zinco foi emitido a 26 m e fluoresceína a 2 m da superfície, sendo que a única exceção está em U69, em que não houve liberação da fluoresceína. Entre U71 e U83 houve emissão de sulfeto de zinco a 26 m e fluoresceína a 56 m acima do nível do solo. Finalmente, entre U84 e U92 houve emissão de sulfeto de zinco a 111 m e fluoresceína a 56 m, com exceção dos experimentos U84 e U87 que não tiveram emissão de fluoresceína. Os arcos empregados na amostragem variaram entre 0,2 e 12,8 km da fonte, mas nem todos os arcos foram utilizados em todos os experimentos.

A última série presente no relatório foi a série V que, em alguns casos, teve emissão de até três traçadores simultaneamente. Em todos os experimentos (V1 até V8) houve emissão de sulfeto de zinco, de V1 até V6 também houve emissão de rodamina-B e nos experimentos V2, V5, V6 e V7 houve emissão de criptônio-85. Todas as emissões foram a 26 m do nível do solo. Os arcos de amostragens utilizados distaram entre 0,2 e 3,2 km da fonte.

2.4.3.3 Experimento de Hanford série 1983 (Hanford 83)

Entre maio e junho de 1983, uma série de seis experimentos realizados em Hanford ficou conhecida como Hanford 83 ou série 83. Nesses experimentos, foram

utilizados dois traçadores simultaneamente. O objetivo era avaliar a deposição dos traçadores, sendo assim sulfeto de zinco (ZnS) foi escolhido como traçador passível de deposição enquanto o hexafluoreto de enxofre (SF₆) foi escolhido como traçador que não sofre deposição. Ambos foram emitidos a 2 m do nível do chão. Os arcos amostradores utilizados distavam 0,1; 0,2; 0,8; 1,6 e 3,2 km da fonte de emissão. Durante os lançamentos, a condição da atmosfera era estável ou quase neutra (DORAN, HORST, 1985). Como no momento não estamos interessados em avaliar deposição do modelo, os dados de interesse para o presente trabalho se referem apenas aos que utilizaram o hexafluoreto de enxofre como traçador.

2.4.4 Experimento de Lillestrom

O Experimento de Lillestrom é um conjunto de experimentos que ocorreram na cidade de Lillestrom, Noruega, durante janeiro e fevereiro de 1987. O traçador escolhido foi o hexafluoreto de enxofre (SF₆) que foi lançado de um mastro a 36 m do nível do solo em um terreno plano e de ocupação residencial, com prédios e árvores de alturas entre 6 e 10 m. As temperaturas estavam bem baixas, em geral abaixo de -20°C, e o solo coberto de neve. As medidas meteorológicas foram realizadas no mastro de lançamento, sendo a velocidade e a direção do vento medidas por um anemômetro sônico instalado a 10 m de altura. Durante a realização dos experimentos, havia pouco vento e em um dos dias de amostragem a componente horizontal de velocidade do vento foi considerada como zero, o que impossibilitou o uso desses dados. Em geral, foi observada uma inversão no perfil vertical de temperatura nos primeiros 100 m de altitude (HAUGSBAKK, TONNESEN, 1989 *apud* OLESEN, 2005).

2.4.5 Experimento de Prairie Grass

Durante julho e agosto de 1956, uma série de experimentos foi realizada nas proximidades da cidade de O'Neill (Nebraska, Estados Unidos). O principal objetivo do projeto foi observar como ocorre a difusão de um traçador gasoso emitido ao nível do solo por uma fonte pontual e contínua e relacionar esse processo de transporte com as condições meteorológicas observadas. O terreno escolhido era plano e com vegetação uniforme, formada basicamente por gramíneas. O traçador utilizado foi o dióxido de enxofre (SO_2), as amostragens ocorreram a 1,5 m do nível do solo em cinco arcos dispostos ao redor da fonte, distando 50, 100, 200, 400 e 800 m da mesma. Foram 68 emissões diferentes, quase todas a 0,46 m do chão, com exceção dos quatro últimos experimentos nos quais a altura de emissão passou a ser 1,5 m. Barad (1958) excluiu os dados dos experimentos 63 e 64 por apresentarem ventos extremamente variáveis e fracos. Cerca de metade dos dados foi obtida durante o dia e a outra metade durante a noite, em alguns casos com presença de inversões de temperatura.

2.5 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

As redes neurais artificiais ou simplesmente redes neurais são modelos matemáticos, baseados na estrutura e no comportamento biológico do sistema nervoso, capazes de simular alguns aspectos de como o cérebro processa informações e, conseqüentemente, são capazes de aprender, ou seja, podem aperfeiçoar seu desempenho em alguma tarefa por meio da experiência.

De maneira geral, as redes neurais artificiais processam a informação em elementos denominados neurônios que são interligados por conexões aptas a transmitir informações ou sinais. As conexões entre os neurônios são chamadas de sinapses e cada sinapse tem um peso associado que, em geral, multiplica o sinal

transmitido. Cada neurônio utiliza uma função de ativação que é aplicada ao sinal de entrada, determinando qual será o sinal de saída do neurônio em questão.

Uma rede neural pode ser caracterizada com base em três aspectos: o padrão de conexões entre os neurônios, denominado de arquitetura ou topologia; o método utilizado para determinar os pesos de cada conexão, chamado de treinamento ou algoritmo de aprendizagem; e pelo tipo de função de ativação empregada (FAUSETT, 1994).

A arquitetura básica de uma rede neural se fundamenta em camadas de neurônios interligados. A camada de entrada não desempenha nenhum papel computacional, ela serve apenas para introduzir os dados de entrada no sistema. Em alguns casos, pode-se utilizar uma ou mais camadas entre a camada de entrada e a camada de saída. Essas camadas são denominadas de camadas ocultas e esse tipo de rede é conhecido como rede multicamadas. As camadas ocultas permitem ao sistema resolver problemas mais complexos, porém demandam treinamentos também mais complexos.

Na Figura 5, a seguir, podemos ver uma representação de uma rede neural artificial em que: X_1 , X_2 e X_3 representam os neurônios da camada de entrada; Y representa o neurônio na camada oculta; Z_1 e Z_2 representam os neurônios na camada de saída; w_1 , w_2 , w_3 , v_1 e v_2 representam as sinapses entre os neurônios.

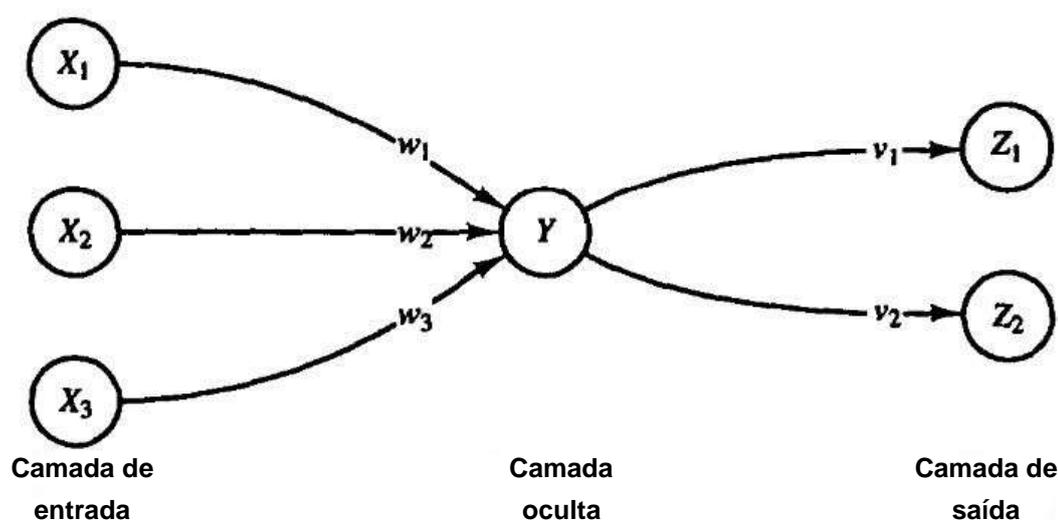


Figura 5 - Esquema representativo de uma rede neural artificial multicamada
FONTE: adaptado de FAUSETT (1994).

É através do treinamento que a rede define o peso de cada sinapse e, para tanto, diversas técnicas foram desenvolvidas. Tais técnicas são divididas em três tipos de treinamento: supervisionado, não supervisionado e por reforço. O treinamento supervisionado consiste em apresentar à rede a solução esperada para cada par de dados de entrada. Assim a rede é capaz de ajustar os pesos das sinapses, comparando o erro entre a sua previsão e a resposta correta, também chamada de alvo ou *target*. No caso do treinamento não supervisionado, não se apresenta o alvo, a própria rede passa a agrupar dados de acordo com suas semelhanças. Assim, os pesos das sinapses são ajustados com o intuito de agrupar os pares de entrada mais parecidos entre si correspondendo a um determinado sinal de saída, ou seja, para pares pertencentes a um mesmo grupo a rede fornece um mesmo valor de saída. No caso do treinamento por reforço, que alguns consideram como um caso particular do treinamento supervisionado, o treinamento ocorre por tentativa e erro. Em caso de acerto, a rede é recompensada, caso contrário, é aplicada uma penalidade à rede. Neste caso, há a intervenção de um agente externo que avalia a acurácia do resultado previsto pela rede.

Algumas das situações nas quais se pode empregar as redes neurais artificiais são: reconhecimento de padrões, categorização ou *clustering*, aproximação de funções, previsões, otimização, controle e associação (JAIN, MAO; 1996).

As vantagens da aplicação de redes neurais artificiais residem em algumas de suas características intrínsecas. Primeiramente, as redes neurais podem ser aplicadas na solução de problemas não-lineares, permitindo um melhor ajuste dos dados. Outro ponto importante é a tolerância ao ruído que permite à rede alcançar uma boa previsão mesmo com os erros e incertezas presentes nos dados. O alto paralelismo das redes permite um rápido processamento com tolerância a falhas. A capacidade da rede em aprender e se adaptar permite ao sistema alterar a sua estrutura de acordo com as mudanças no meio e sua habilidade de generalização permite que a rede trabalhe com dados aos quais ainda não foi apresentada (BASHEER, HAJMEER; 2000).

Na literatura, podemos encontrar uma vasta variedade de redes neurais cada uma com suas particularidades (e.g. arquitetura, aplicabilidades, limitações, treinamento). A rede de interesse para o presente estudo é o *perceptron*

multicamadas treinado pelo algoritmo de retropropagação ou *backpropagation*. A arquitetura desse tipo de rede neural artificial se caracteriza por apresentar ao menos uma camada oculta. Em geral, se utiliza de uma função não-linear como função de ativação e é a superposição de funções de ativação não-lineares que permitem a este tipo de rede aproximar funções extremamente não-lineares.

As redes tipo *backpropagation* são as mais amplamente utilizadas. Elas são treinadas de forma supervisionada e aprendem por meio da correção do erro, ou seja, o ajuste dos pesos das sinapses é feito de forma a se obter o menor erro entre o valor de saída da rede e a resposta real.

Esse algoritmo foi proposto inicialmente por Werbos (1974), mas foi popularizado por Rumelhart *et al.* (1986). Ele se baseia no método do gradiente descendente para localizar o mínimo global de uma superfície de erro. Inicialmente, se atribuem valores aleatórios pequenos às sinapses, em seguida os dados de entrada são apresentados à rede e processados gerando um vetor de saída. Compara-se o valor obtido pela rede com o resultado esperado e o erro é então propagado da camada de saída em direção à camada de entrada. Em seguida, os pesos das sinapses são ajustados de maneira a minimizar o erro com base no gradiente local da superfície de erro. Esse procedimento é repetido até que se satisfaça a condição de parada, ou seja, até que a diferença entre o resultado obtido pela rede e o valor real esperado esteja dentro de um limite definido como satisfatório.

Uma rede neural artificial bem projetada e treinada deve produzir resultados satisfatórios mesmo quando os dados de entrada forem um pouco diferentes dos dados usados no treinamento, porém, em alguns casos, a rede é apresentada a tantos vetores de entrada e saída que acaba “memorizando” os dados de treinamento. Nesses casos, ocorre o *overtraining* caracterizado pela perda da capacidade de generalização da rede (HAYKIN, 1999).

O conjunto de dados utilizados para treinar uma rede neural é subdividido em conjunto de treinamento, de teste e de validação. Os dados de treinamento correspondem ao maior conjunto de dados e devem ser representativos dentro da amostra. O conjunto de teste é apresentado à rede após cada época (ciclo) de treinamento. Seu erro correspondente deve diminuir ao longo das épocas de treinamento até um ponto ótimo desejado. Se ultrapassarmos a quantidade ótima de

épocas de treinamento, o erro do conjunto de teste passa a aumentar, caracterizando o *overtraining*. Em alguns casos, o erro do conjunto de teste passa a oscilar indicando que é preciso reduzir a taxa de aprendizagem para que a rede possa encontrar o mínimo global.

Por fim, temos o grupo de validação que deve ser apresentado à rede ao fim do treinamento, quando os valores dos pesos das sinapses estejam em sua configuração ótima. Os valores encontrados pela rede deverão ser confrontados com os resultados esperados a fim de se verificar a eficácia da técnica. É a partir deste resultado que se determina se a rede foi capaz de desempenhar sua função como o esperado.

2.5.1 O emprego de redes neurais artificiais nas ciências atmosféricas

As redes neurais têm sido empregadas nos mais diversos campos abordados pelas ciências atmosféricas e, apesar da complexidade e da não-linearidade dos problemas em questão, têm-se mostrado uma ferramenta útil e confiável.

Alguns exemplos das aplicações das redes neurais nas mais diversas circunstâncias são: previsão do campo de intensidade de chuvas com uma hora de antecedência (FRENCH *et al.*, 1992); prognóstico de concentração de ozônio atmosférico (YI e PRYBUTOK, 1996); estimativa do índice de radiação global com base na localização do ponto de interesse e em parâmetros meteorológicos de fácil medição para o aproveitamento da energia solar em áreas remotas (AL-ALAWI, AL-HINAI, 1998); detecção de casos em que os padrões de circulação atmosférica sejam capazes de desencadear tornados (MARZBAN, STUMPF, 1996); conversão das medições de satélite de radiação de banda larga em estimativas de radiação de onda curta emitida e radiação de onda longa absorvida no topo da atmosfera (LOUKACHINE, LOEB, 2003); previsão de dados de insolação como radiação infravermelha, ultravioleta e radiação global diária (ELMINIR *et al.*, 2005); estimativa da produção de gás metano em um aterro sanitário ao longo do tempo (OZCAN *et*

al., 2006); previsão de temperaturas mínimas e máximas na Índia durante os meses de monções de verão (DE, DEBNATH, 2009); busca de uma associação entre condições climáticas e internações hospitalares por doenças respiratórias causadas por poluição atmosférica (NASCIMENTO *et al.*, 2009); melhor compreensão das relações entre variáveis meteorológicas e a altura da camada limite em situações de estabilidade atmosférica (LI, 2013).

Outras aplicações de redes neurais artificiais nas ciências atmosféricas, mais especificamente do *perceptron* multicamadas, podem ser encontradas em Gardner e Dorling (1998).

2.5.2 Aplicação de redes neurais em estudos de dispersão atmosférica

Tendo em vista que, dadas as diversas fontes de erro a que estão submetidos, os modelos de dispersão não têm sido capazes de gerar resultados de alta confiabilidade, a comunidade científica vem se empenhando em descobrir maneiras de tornar tais modelos mais acurados. Alguns autores buscam novas parametrizações de variáveis (ULKE, 2000), outros buscam desenvolver novos modelos com base em novas premissas (TIRABASSI, RIZZA; 1994). Por sua vez, um grupo de pesquisadores na Itália propôs o uso de redes neurais artificiais integradas com diversos tipos de modelos de dispersão, tais trabalhos serão mais bem detalhados na presente seção. Nestes estudos, as redes neurais foram utilizadas como uma espécie de filtro capaz de fornecer resultados mais coesos com os dados observados em experimentos de campo.

Em um dos primeiros experimentos deste tipo, Pelliccioni e Tirabassi (2001a, 2001b) aplicaram uma rede neural aos resultados do modelo SPM (*Skewed Puff Model*) que se baseia na teoria de similaridade de Monin-Obukhov. O modelo representa uma fonte contínua por meio da superposição de uma série de emissões pontuais, ou *puffs*. A rede neural utilizada tinha como dados de entrada a velocidade de atrito, o comprimento de Monin-Obukhov, a distância do receptor até a fonte e a concentração prevista pelo SPM. Uma rede foi treinada especificamente para usar

os dados do experimento de Prairie Grass, cuja emissão ocorre próxima ao nível do solo; uma segunda rede foi treinada utilizando-se os dados do experimento de Copenhagen, oriundos de uma fonte de emissão elevada.

Com o intuito de determinar a reprodutibilidade dos níveis de concentração, foi calculada a percentagem da diferença entre as concentrações experimentais (C_{sperim}) e as concentrações previstas pelos modelos e corrigidas pela rede (C_{SPM+RN}).

$$\Delta C(\%) = \frac{(C_{sperim} - C_{SPM+RN})}{C_{sperim}} \cdot 100 \quad (23)$$

Em ambos os casos estudados, a rede foi capaz de melhorar significativamente os resultados previstos. No caso do experimento de Prairie Grass, a correlação, aplicando-se apenas o modelo SPM, era 0,72 e o desvio padrão era 85,42. Aplicando-se a rede, a correlação passou a ser 0,97 e o desvio padrão 31,98. No caso de Copenhagen, a melhora na correlação foi ainda mais acentuada, passando de 0,35 sem a rede, para 0,98 com a rede. Neste caso, o desvio padrão passou de 43,73 para 9,89 com o uso da rede. É importante ressaltar que as estatísticas foram calculadas para a distribuição de reprodutibilidade das concentrações, obtida pela Equação 23, sendo, portanto, adimensionais. Por fim, os autores concluem que a metodologia apresentada ainda pode ser generalizada, abrindo assim novas perspectivas para os modelos integrados e para as simulações de situações complexas.

Pelliccioni, Tirabassi e Gariazzo (2003a, 2003b) aplicaram uma rede neural como filtro para as simulações do modelo VHDM (*Virtual Height Dispersion Model*). Tal modelo foi desenvolvido para determinar concentrações ao nível do solo cuja emissão ocorreu a partir de uma fonte elevada. O modelo, baseado na solução gaussiana da equação da advecção-difusão, empregou uma nova parametrização na qual a altura da fonte de emissão é expressa em função da difusividade turbulenta e do perfil vertical do vento. A rede neural empregada era um *perceptron* com 3 camadas. A camada de entrada, com 7 neurônios, teve como *inputs* a velocidade de atrito, o comprimento de Monin-Obhukov, a temperatura e a

velocidade do vento ao nível do solo, a altura da camada de mistura, a distância entre o ponto de amostragem e a fonte de emissão e a concentração prevista pelo modelo. Foram testadas três configurações da camada oculta, com 8, 10 e 12 neurônios. O único neurônio na camada de saída retornava a concentração corrigida pela rede. Para a validação da metodologia, foram utilizados dados do experimento de Kincaid que consiste na emissão de hexafluoreto de enxofre (SF_6), a partir de uma fonte elevada, com levantamento de pluma e sobre um terreno rural plano. As amostragens ocorreram em arcos entre 0,5 e 50 km do ponto de emissão. Os resultados das análises de sensibilidade mostraram que o melhor desempenho foi obtido quando se utilizou o modelo de dispersão e a rede neural em conjunto, sendo a rede com 12 neurônios na camada oculta e apresentando-se a ela 100% dos dados. Neste caso, a correlação foi de 0,92 e o desvio padrão de $9,2 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Esses resultados foram muito melhores do que os observados quando apenas o modelo VHDM foi utilizado (0,29 de correlação e $30 \mu\text{g}/\text{m}^3$ de desvio padrão). A rede ainda se mostrou capaz de reduzir a tendência sistemática do modelo em subestimar os valores de concentração. Estatisticamente, a aplicação da rede apresentou um desempenho muito superior ao obtido apenas pelo modelo, apresentando uma melhora significativa nos cinco parâmetros estatísticos escolhidos: correlação (R), fator de dois ($Fac2$), erro quadrático médio normalizado ($NMSE$), desvio fracional (FB) e desvio fracional padrão (FS).

Pelliccioni, Gariazzo e Tirabassi (2004) aplicaram uma rede neural artificial para aumentar a acurácia dos resultados de um modelo de partículas lagrangeano, conhecido como SPRAY. O intuito era simular a dispersão dos poluentes emitidos por uma grande indústria cimenteira localizada nas proximidades da cidade de Guidonia, na Itália. Para poder comparar os resultados previstos com os valores reais medidos, foram utilizadas três diferentes estações de monitoramento na aquisição de dados meteorológicos e na quantificação de óxidos de nitrogênio (NO_x). Optou-se por utilizar um modelo lagrangeano, tendo em vista a complexidade do terreno e do padrão de circulação, além da não-estacionariedade e da não-homogeneidade do problema. Primeiramente, os pesquisadores realizaram as previsões utilizando o modelo lagrangeano, em seguida aplicaram a rede neural na tentativa de melhorar os resultados. A arquitetura da rede contava sempre com uma única camada oculta que poderia ter 5, 8 ou 10 neurônios. As variáveis selecionadas

como dados de entrada foram: a velocidade de atrito, o gradiente vertical de temperatura, a temperatura média, as coordenadas geométricas verticais e horizontais das estações de monitoramento e as concentrações de NO_x previstas pelo modelo lagrangeano. Observou-se que o melhor desempenho ocorreu com 8 neurônios na camada oculta e apresentando à rede 100% dos dados durante a fase de treinamento. Nesta configuração, o uso do modelo de dispersão acoplado à rede neural conseguiu uma correlação de 0,86. Comparando-se os dados observados e os simulados, pode-se observar que a rede foi capaz de melhorar os resultados obtendo valores mais próximos aos reais. Os autores ressaltam que o modelo lagrangeano utiliza apenas os dados de emissão da indústria sem considerar outras possíveis fontes de NO_x , como por exemplo o tráfego de veículos. Em contrapartida, a rede foi treinada utilizando os dados observados que contabilizam essas outras fontes de emissão. Outro ponto importante do estudo se refere à comparação entre o desempenho da rede sendo utilizada como um modelo de previsão (ou seja, sem considerar como dado de entrada para a rede os dados previstos pelo modelo lagrangeano) e o desempenho do conjunto - modelo de dispersão mais rede neural. Os autores observaram que utilizar a rede como um filtro capaz de tornar mais acurado o resultado previsto por um modelo de dispersão é mais eficiente do que tentar utilizar apenas a rede como substituta do modelo. Segundo eles, a concentração de NO_x prevista pelo SPRAY é um dado de entrada da rede de grande importância para se garantir um resultado ótimo.

Em 2006, Pelliccioni e Tirabassi republicaram os dados apresentados nos artigos de 2001a, 2001b, 2003a e 2003b de forma unificada e mais amplamente discutida. Neste novo artigo, eles introduzem os valores dos parâmetros estatísticos (NMSE, R, FA2, FB e FS) para os dados de Copenhagen e Prairie Grass simulados exclusivamente por meio do modelo SPM e também por meio da metodologia integrada (modelo SPM combinado com a rede neural). Novamente ficou evidente a significativa melhora nas estatísticas quando a rede neural é aplicada. Os mesmos parâmetros estatísticos já tinham sido apresentados para os dados de Kincaid nos artigos publicados em 2003.

Pelliccioni e Tirabassi (2008) utilizaram uma rede neural associada ao modelo não-gaussiano ADMD. Os dados escolhidos para a validação foram os do experimento de Indianápolis em que hexafluoreto de enxofre (SF_6) foi emitido por

uma fonte elevada (83,8 m) sobre um terreno predominantemente urbano. A concentração ao nível do solo foi amostrada em 12 arcos distando entre 0,25 e 12 km da fonte. Após um teste de sensibilidade, os autores optaram por utilizar como dados de entrada da rede: a altura da camada limite, o comprimento de Monin-Obukhov, a distância entre o ponto de observação e a fonte de emissão e os valores de concentração previstos pelo modelo ADMD. Foram testadas arquiteturas com 6, 8 e 12 neurônios na camada oculta, sendo o modelo com 8 neurônios o que apresentou um melhor desempenho. Os dados disponíveis foram aleatoriamente divididos em conjunto de treinamento (50%) e de teste (50%). Levando-se em conta o desempenho apenas do modelo, os autores consideraram o desempenho da simulação como pobre, com uma tendência sistemática acentuada de subestimar as concentrações reais. Entre outras observações, os autores concluem que o emprego da rede foi capaz de melhorar todos os principais parâmetros estatísticos, propiciando a obtenção de resultados mais realistas.

Os trabalhos aqui citados corroboram a eficácia da rede neural quando associada a um modelo de dispersão atmosférica. Os modelos de dispersão são baseados em algumas condições específicas e, portanto, dependem da concordância entre as hipóteses adotadas e as condições físicas reais do fenômeno. Em contrapartida, a rede neural tem a capacidade de generalização, o que a torna capaz de apresentar bons resultados mesmo para um conjunto de dados ao qual ainda não foi apresentada. A associação destes dois métodos tem se revelado promissora na busca por melhorias na qualidade das previsões.

3 METODOLOGIA

De maneira geral, o propósito deste estudo é comparar o desempenho de um modelo matemático de dispersão atmosférica, no caso o MODELAR, antes e depois da utilização de uma rede neural, objetivando a melhoria na acurácia dos resultados obtidos pelo modelo, tornando-os mais confiáveis.

Para isso foi selecionada uma base de dados de experimentos de dispersão atmosférica que pudessem ser simulados pelo modelo supracitado. Em seguida, tais experimentos foram processados pelo modelo e os resultados obtidos foram comparados estatisticamente com os valores reais observados durante os experimentos. O próximo passo foi treinar uma rede neural especializada para que ela pudesse corrigir os valores simulados pelo modelo de modo que estes se aproximassem o máximo possível dos valores observados. A fim de definir se houve ganho no desempenho das simulações ao se empregar a rede neural, compararam-se as estatísticas resultantes da aplicação do MODELAR com as estatísticas após a utilização da rede neural.

A metodologia empregada durante este processo está mais detalhadamente exposta nas seções que se seguem.

3.1 SELEÇÃO DOS DADOS

Uma das grandes dificuldades de se trabalhar com experimentos de dispersão atmosférica é ter acesso aos dados. Muitos dos experimentos consagrados foram realizados há muitos anos e sua documentação original encontra-se datilografada. Alguns desses relatórios foram escaneados e estão disponíveis em meio digital, porém ainda persiste a dificuldade de se digitalizar os dados. Outro problema é a falta de uma base de dados unificada e de fácil acesso para o público interessado. Nesse ponto, o sítio de J. S. Irwin (<http://www.jsirwin.com/>) foi de grande ajuda para a realização do presente trabalho,

já que disponibiliza relatórios de experimentos meteorológicos e de dispersão, bem como alguns dados de forma digitalizada.

Inicialmente, foi feito um levantamento dos diversos experimentos que poderiam ser pertinentes. Em alguns casos, foram encontrados apenas alguns dados em planilhas eletrônicas sem os respectivos relatórios, em outros apenas cópias digitalizadas com tão baixa qualidade que se tornou quase impossível ler os dados ali descritos. Os 28 experimentos arrolados e pesquisados foram: AGA, Alaska, Baldwin, Bowline, Bull Run, Cabauw, Clifty Creek, Copenhagen, DAEC, EOOCR, Green Glow, Hanford 64, Hanford 67, Hanford 83, Indianápolis, Iron Mountain, Kincaid, Lee Wind Tunnel, Lillestrom, Lovet, Martins Creek, Millstone, Minnessota, Tracy, Ocean Breeze e Dry Gulch, Prairie Grass, Round Hill e Westvaco.

Tendo acesso aos dados experimentais foi preciso avaliar se eles estavam dentro dos objetivos e das limitações do trabalho a ser desenvolvido. Como a nossa intenção é simular as condições observadas nos experimentos, empregando o MODELAR, algumas informações básicas se fazem necessárias, conforme seção 3.2. Primeiramente, observou-se se o experimento tratava da emissão de um elemento traçador com medidas de concentração ao longo da pluma em que a fonte fosse considerada pontual e contínua. Em seguida, avaliou-se se os dados disponíveis eram suficientes para realizar a simulação no MODELAR ou se eles permitiam calcular as variáveis faltantes. Assim, selecionamos 7 experimentos a serem utilizados. São eles: Cabauw, Copenhagen, Hanford 64, Hanford 67, Hanford 83, Lillestrom e Prairie Grass. A Tabela 1, resume as informações de cada um dos experimentos contendo a quantidade de rodadas e observações utilizadas no presente trabalho, bem como as fontes das quais os dados foram retirados.

Tabela 1 - Resumo da quantidade de dados de cada experimento com suas respectivas fontes

Experimento	Rodadas	Observações	Fonte
Cabauw	13	25	IRWIN, 2014; AGTERBERG <i>et al.</i> , 1983
Copenhagen	9	23	GRYNING, LYCK, 2002; OLESEN, 2005
Hanford 64	14	51	IRWIN, 2014
Hanford 67	54	627	IRWIN, 2014; NICKOLA, 1977
Hanford 83	6	30	DORAN, HORST, 1985
Lillestrom	8	22	OLESEN, 2005
Prairie Grass	67	335	IRWIN, 2014; BARAD, 1958
Total		1113	

Ao longo do desenvolvimento do trabalho alguns dados não puderam ser aproveitados por uma série de questões. Em alguns casos, problemas de medições ou falta de alguns dados impossibilitavam as simulações ou o cálculo de algumas variáveis necessárias. Em outros casos, o MODELAR não foi capaz de realizar a simulação corretamente, apresentando resultados negativos ou incoerentes, o que resultou na exclusão desses dados. Assim, restaram 1067 observações que foram classificados da seguinte forma: 238 observações correspondentes a uma condição de estabilidade atmosférica estável ($z/L > 1$); 818 observações correspondentes a uma estabilidade atmosférica neutra ($-1 \leq z/L \leq 1$); 11 observações correspondentes a uma estabilidade atmosférica instável ($z/L < -1$), onde z/L é o parâmetro de estabilidade de Monin-Obukhov.

3.2 VARIÁVEIS DE INTERESSE

É de suma importância que, ao selecionar os experimentos a serem utilizados, se observe a presença de todas as variáveis de interesse ou ao menos dos dados mínimos necessários para calcular as variáveis faltantes.

Os dados de interesse para o presente trabalho podem ser separados em dois grupos. O primeiro corresponde aos dados utilizados pelo MODELAR para simular os experimentos de campo. São eles:

- altura de amostragem (m);
- temperatura do ar (°C);
- altura na qual a temperatura foi medida (m);
- altura em que ocorreu a emissão (m);
- taxa de emissão (g/s);
- altura de rugosidade aerodinâmica (m);
- altura da camada limite (m)
- velocidade de atrito (m/s);
- comprimento de Monin-Obukhov (m).

O segundo grupo permite comparar os valores observados durante os experimentos de campo com os resultados obtidos pelas simulações. Sendo eles:

- os valores observados de concentração média integrada na direção transversal ao vento e normalizada pela taxa de emissão (s/m²)
- as distâncias em que tais concentrações foram observadas (km).

3.3 CÁLCULO DAS VARIÁVEIS NÃO FORNECIDAS

Em alguns casos, se fez necessário estimar matematicamente a altura da camada limite (hbl) e a altura de rugosidade aerodinâmica (z_0).

No caso da altura da camada limite, consideramos o sugerido por Arya (1999)

$$hbl \cong 0,3 \frac{u_*}{|f|}, \quad \text{para } -1 \leq \frac{z}{L} \leq 1 \quad (24)$$

$$hbl \cong 0.4 \left(u_* \frac{L}{|f|} \right)^{1/2}, \quad \text{para } \frac{z}{L} > 1 \quad (25)$$

em que u_* é a velocidade de atrito, L é o comprimento de Monin-Obukhov e f é o parâmetro de Coriolis dado por

$$f = 2 \Omega \text{sen}(\phi) \quad (26)$$

sendo Ω a velocidade angular de rotação da Terra ($7,2921 \times 10^{-5}$ rad/s) e ϕ a latitude do local.

Não foi necessário calcular a altura da camada limite para os casos em que $z/L \leq -1$, já que tal informação estava disponível nos relatórios dos experimentos.

Para calcular a altura de rugosidade aerodinâmica são necessárias medidas de velocidade do vento em várias alturas. Assim, considerando o perfil do vento como logarítmico, a altura em que a velocidade do vento for nula corresponde à altura de rugosidade aerodinâmica (z_0), conforme representado esquematicamente na Figura 6.

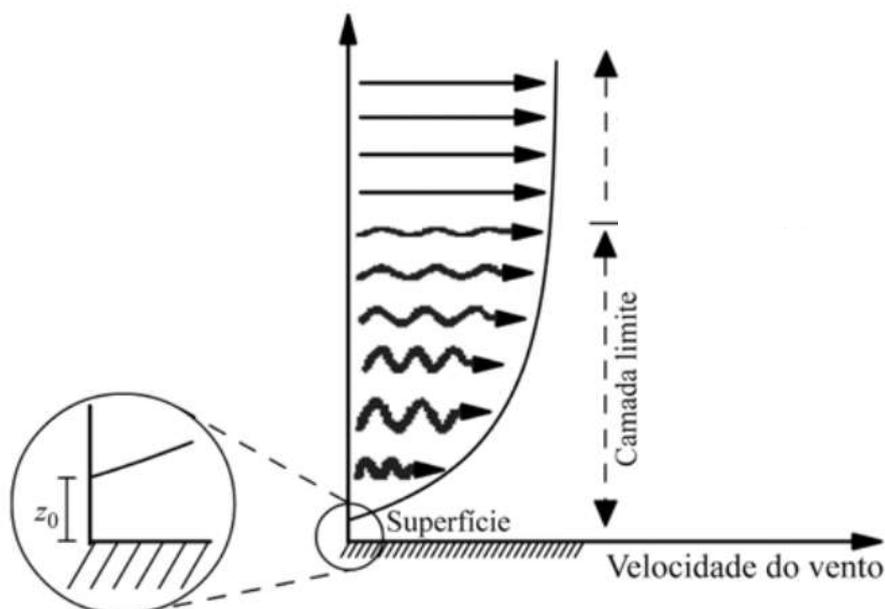


Figura 6 - Perfil da velocidade do vento
 FONTE: MARTINS *et al.*, 2008.

3.4 SIMULAÇÕES NO MODELAR

Os dados reais obtidos através dos experimentos foram processados utilizando o MODELAR. Em razão da grande quantidade de dados, foi desenvolvido um *script* capaz de fornecer ao modelo os dados necessários de forma automatizada, ou seja, sem a obrigatoriedade do usuário inserir manualmente o valor de cada variável.

Os resultados obtidos nessas simulações foram comparados com os dados observados para avaliar o desempenho do modelo. Em seguida, esses dados foram utilizados no treinamento da rede neural para comparar o desempenho do modelo antes e depois da correção realizada pela rede.

3.5 TREINAMENTO E OPERAÇÃO DA REDE NEURAL ARTIFICIAL

A rede neural artificial utilizada na realização do presente estudo foi o *perceptron* multicamada. Dentre as funções de ativação consagradas na literatura, optou-se por utilizar a função identidade no neurônio da camada de saída (Equação 27), já que ele não limita a amplitude dos resultados fornecidos. No caso da camada oculta, utilizou-se a função tangente hiperbólica delimitada entre [-1:1] (Equação 28), já que suas características se adequam melhor ao mapeamento não-linear realizado. A Figura 7 traz a representação gráfica das funções de ativação empregadas.

$$f(x) = x \quad (27)$$

$$f(x) = \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}} \quad (28)$$

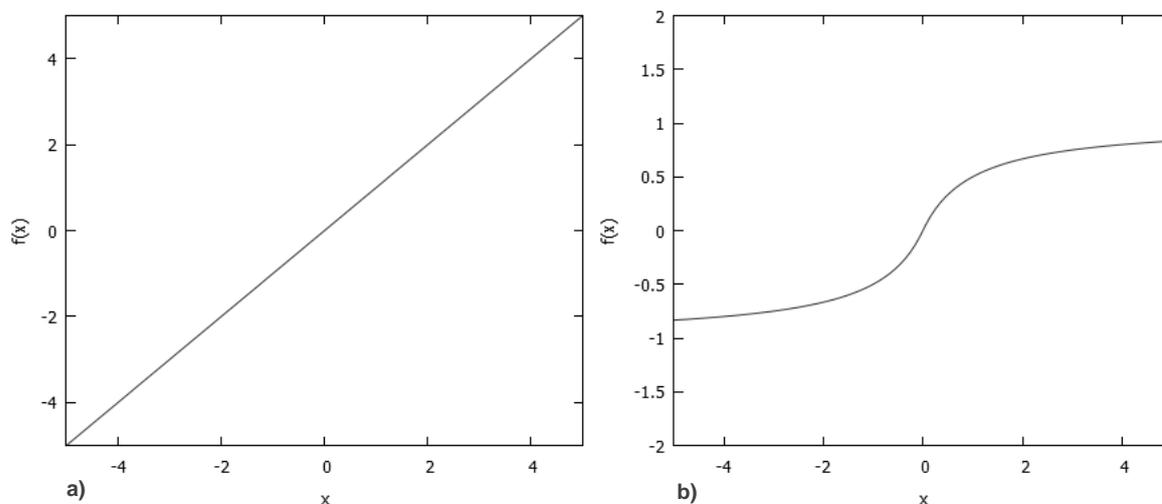


Figura 7 - Funções de ativação a) função identidade; b) função tangente hiperbólica delimitada entre [-1:1].

O treinamento da rede foi realizado empregando-se o algoritmo *backpropagation*, já discutido na seção 2.4. A Figura 8 é uma representação do algoritmo utilizado tomando como base o descrito por Fausett (1994), onde são apresentadas detalhadamente todos os procedimentos e equações referentes à técnica de treinamento empregada.

O programa que processa a rede foi desenvolvido pelo Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Almeida em linguagem FORTRAN 95. O compilador utilizado foi o FTN95 e a interface *Plato Interactive Program Development Environment* da companhia *Silverfrost*.

Os valores iniciais que são atribuídos aleatoriamente aos pesos das sinapses estão restritos a um intervalo entre -0,2 e 0,2, a fim de garantir que sejam valores pequenos como sugerido pela literatura (FAUSETT, 1994).

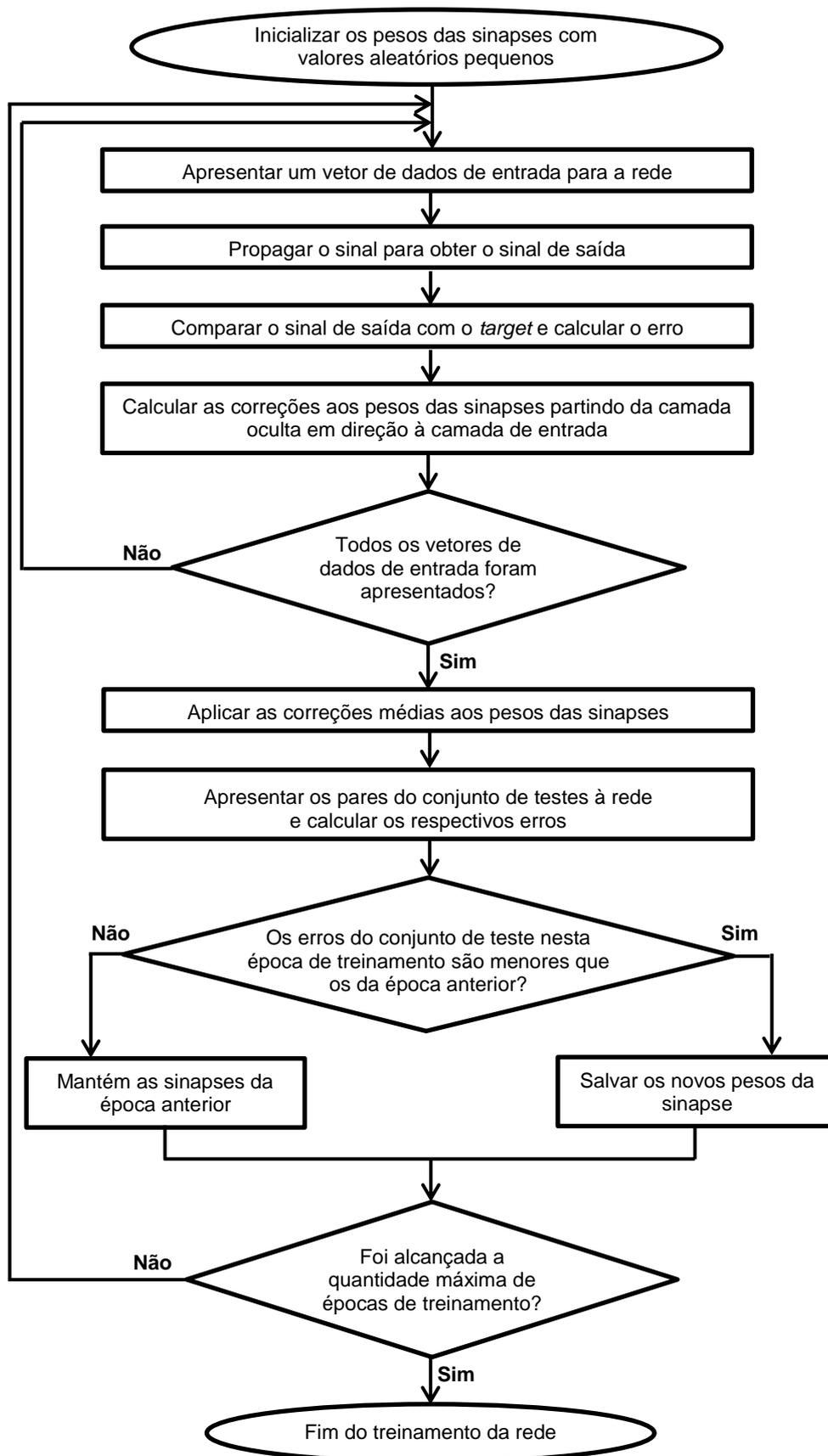


Figura 8 - Fluxograma do treinamento da rede neural por meio do algoritmo *backpropagation*.

Inicialmente, o programa normaliza o conjunto de dados entre -1 e 1 e então o separa de forma aleatória em conjunto de treinamento, de teste e de validação, seguindo a proporção aproximada de 70%, 15% e 15%, respectivamente. Ao utilizar a rede, o usuário deve determinar a quantidade de neurônios na camada de entrada que corresponde aos dados que serão utilizados de acordo com cada experimento, e.g. velocidade de atrito, altura de emissão, altura de rugosidade aerodinâmica, comprimento de Monin-Obukhov, entre outros. É preciso também especificar a quantidade de neurônios na camada de saída, que no caso será sempre um neurônio tendo em vista que desejamos prever exclusivamente a concentração em um dado ponto. Para determinar a quantidade de neurônios na camada oculta, foram realizados diversos testes para avaliar qual valor apresenta um melhor desempenho. Um critério comumente adotado para escolher a quantidade de neurônios na camada oculta se baseia em tomar a média aritmética entre a quantidade de neurônios nas camadas de entrada e de saída. Seguindo este critério, para as simulações aqui propostas, teríamos entre 4 e 6 neurônios na camada oculta. Então, optou-se por unificar as simulações começando sempre com 5 neurônios na camada oculta e em seguida aumentando para 10 e depois 15 neurônios a fim de determinar qual configuração obteve os melhores resultados.

Um dos arquivos de saída da rede nos fornece uma tabela com a época de treinamento e os respectivos erros de treinamento e de teste, a partir destes dados podemos plotar um gráfico de erro *versus* época de treinamento (Figura 9) que nos permite avaliar a evolução do erro. A partir da análise deste gráfico, podemos determinar o número de épocas de treinamento a serem adotadas. O ponto ideal que deve servir como referência é quando a curva do erro do conjunto de teste mais se aproxima do erro do conjunto de treinamento. Caso as duas curvas sejam muito distantes deve-se tentar aumentar a quantidade de iterações. Caso o erro do conjunto de teste passe a aumentar a partir de um determinado ponto ao invés de diminuir, deve-se considerar a quantidade de épocas de treinamento antes de o erro começar a aumentar. Este comportamento de aumento na magnitude do erro referente ao conjunto de validação indica o *overtraining*.

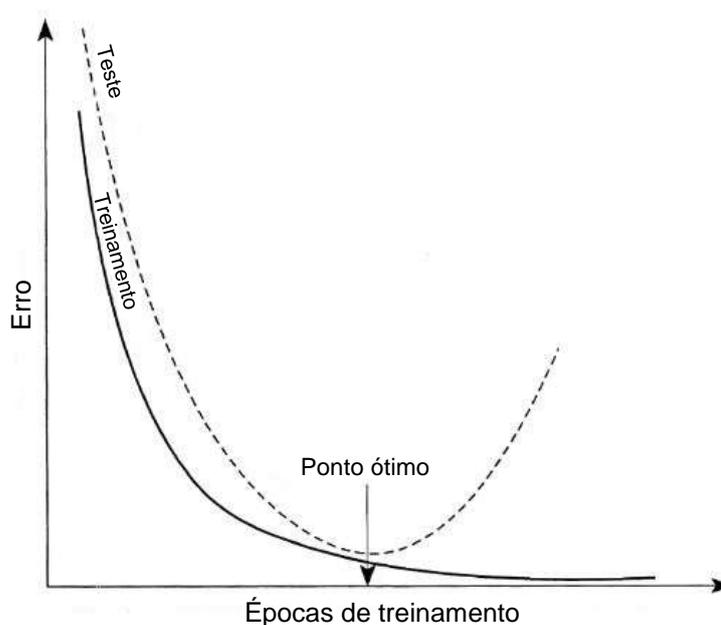


Figura 9 - Evolução do erro para os conjuntos de treinamento e teste ao longo das épocas de treinamento.

FONTE: adaptado de BASHEER, HAJMEER, 2000.

Em alguns casos, podemos observar uma oscilação na curva do gráfico de erro *versus* época de treinamento, em que o valor do erro do conjunto de teste passa a subir e descer conforme o avanço nas épocas de treinamento. Este tipo de comportamento indica que a taxa de aprendizagem, ou seja, a taxa em que os pesos serão ajustados está com um valor muito alto para o problema, fazendo com que a rede não consiga encontrar um ponto próximo o suficiente do mínimo global. Nestes casos, se faz necessário diminuir o valor da taxa de aprendizagem até que esta anomalia não seja mais observada.

Cabe ao usuário definir, por meio de experimentação, o número de épocas de treinamento e a taxa de aprendizagem da rede. No caso da taxa de aprendizagem, adotou-se um valor inicial de 0,03 que poderia ser alterado quando necessário. Já no caso das épocas de treinamento, em geral, o valor inicial foi de 100 000 épocas e esse valor foi sendo ajustado com base na análise do gráfico da evolução do erro. A quantidade máxima de épocas de treinamento utilizadas foi de 250 000.

Um dos arquivos de saída da rede apresenta os dados do conjunto de validação que foram observados durante os experimentos em campo e o respectivo valor de concentração previsto pelo MODELAR. A partir deste arquivo, podemos realizar a análise estatística dos dados para avaliar a acurácia do modelo. Por fim, outro arquivo de saída nos fornece os valores de concentração observados em campo e os valores corrigidos previstos pela rede neural, a análise estatística desses dados nos permite avaliar se houve melhora no desempenho comparando os valores que foram previstos pela rede e pelo MODELAR.

O tempo de processamento necessário para o treinamento da rede neural é altamente dependente de sua topologia, do tamanho do conjunto de dados e da quantidade de épocas de treinamento. Um dos processamentos mais longos durou cerca de 10 minutos e foi para o conjunto dos casos neutros e instáveis com 15 neurônios na camada oculta e 250 000 épocas de treinamento.

3.6 ANÁLISE ESTATÍSTICA

Para a avaliação do desempenho do modelo foram adotados alguns dos parâmetros estatísticos sugeridos por Hanna (1989, 1993), sendo eles: desvio fracional (*fractional bias - FB*), erro quadrático médio normalizado (*normalized mean square error - NMSE*), fator de dois (*Fac2*), correlação de Pearson (*R*) e também o desvio fracional padrão (*FS*). Tais parâmetros são definidos como:

$$FB = \frac{\bar{X}_o - \bar{X}_p}{0,5 (\bar{X}_o + \bar{X}_p)} \quad (29)$$

$$NMSE = \frac{\overline{(X_o - X_p)^2}}{\bar{X}_o \bar{X}_p} \quad (30)$$

$$Fac2 = \text{fração dos dados compreendidos em } 0,5 \leq \frac{X_p}{X_o} \leq 2 \quad (31)$$

$$R = \frac{\overline{(X_o - \bar{X}_o)(X_p - \bar{X}_p)}}{\sigma_o \sigma_p} \quad (32)$$

$$FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0,5 (\sigma_o + \sigma_p)} \quad (33)$$

sendo X_o a grandeza observada e X_p a grandeza correspondente prevista pelo modelo, σ_o e σ_p os respectivos desvios padrões. A barra sobre as variáveis indica a média do conjunto.

Ao longo do presente trabalho, o fator de dois será representado de duas maneiras distintas com o intuito facilitar a interpretação dos dados. Ele poderá ser representado na sua forma absoluta (*Fac2*), representando a quantidade absoluta de dados da amostra encontrados no intervalo supracitado, e em forma de percentagem, sendo nesse caso indicado como *Fac2 (%)*.

Um modelo que fosse capaz de representar a realidade com perfeita precisão e acurácia deveria apresentar valores de *FB*, *NMSE* e *FS* iguais a zero e *Fac2* e *R* iguais a um. Tendo em vista a impossibilidade de modelos absolutamente perfeitos, Chang e Hanna (2004) estabeleceram critérios para os quais um modelo pode ser considerado como tendo desempenho satisfatório, para isso: $Fac2 \geq 50\%$, $-0.3 < FB < 0,3$ e $NMSE \leq 0,5$. As informações supracitadas estão dispostas na Tabela 2, a seguir.

Tabela 2 - Valores tidos como ideais e intervalos definidos como bons para os parâmetros estatísticos analisados

Parâmetro	Valor Ideal	Valor Bom*
Desvio Fracional (FB)	0	$-0,3 < FB < 0,3$
Erro Quadrático Médio Normalizado (NMSE)	0	$NMSE < 0,5$
Fator de Dois (Fac2)	100%	$Fac2 \geq 50\%$
Correlação (R)	1	-
Desvio Fracional Padrão (FB)	0	-

*como definido por Chang e Hanna (2004)

Quando o *FB* for negativo, indica uma tendência do modelo de superestimar os valores, já quando *FB* for positivo, indica que o modelo subestima as concentrações observadas. Porém, é preciso considerar que o *FB* representa apenas o viés sistemático do modelo, sendo assim, é possível que previsões muito defasadas apresentem bons valores de *FB* devido ao cancelamento de erros. O *FS* se baseia em uma escala linear e indica a variabilidade dos resultados, levando em consideração os desvios padrões das concentrações observadas e previstas. O *NMSE* evidencia os desvios entre concentrações previstas e observadas. Ele é uma medida de espalhamento capaz de indicar tanto erros sistemáticos quanto erros aleatórios. O fator de dois representa a quantidade de dados que se encontram entre metade e o dobro da concentração real observada, sendo considerado um parâmetro mais robusto por não ser demasiadamente influenciado por valores discrepantes. Por fim, a correlação de Pearson expressa o grau de associação e da relação linear entre duas variáveis. Portanto, ela é insensível a fatores aditivos ou multiplicativos, ou seja, um modelo que apresenta a tendência de prever o triplo do valor real observado pode ter bons valores para *R*, mesmo tendo grande discrepância entre os valores reais e previstos. Este parâmetro também é sensível a alguns valores discrepantes, por exemplo, alguns bons valores de previsão para dados extremos podem resultar em bons valores de *R* mesmo que haja pouca correlação nos dados intermediários.

Deste modo, o uso de vários parâmetros estatísticos se faz necessário para a correta avaliação dos resultados, já que é preciso considerar as características e limitações de todo um conjunto de parâmetros a fim de se evitar conclusões tendenciosas.

3.7 EXPERIMENTOS COM A REDE NEURAL ARTIFICIAL

Como já citado, foram treinadas duas redes neurais artificiais. Uma especializada nos casos correspondentes a uma estabilidade atmosférica estável e outra especializada no conjunto dos casos de estabilidade atmosférica neutra e instável.

Para melhor situar o leitor acerca das fases do treinamento, foi definida a seguinte nomenclatura: teste; simulação e tentativa. Os testes diferem entre si pela escolha das variáveis que serão utilizadas como dado de entrada da rede. Por sua vez, as simulações apresentam separações distintas nos conjuntos de treinamento, teste e validação. Para cada nova simulação, é realizada uma nova separação aleatória dos dados evitando assim que decisões sejam tomadas considerando uma única amostra. Por fim, as tentativas consistem em testar diversas configurações da rede neural (épocas de treinamento, taxa de aprendizagem e quantidade de neurônios na camada oculta) a fim de obter os melhores resultados.

Com o intuito de evitar que as separações do conjunto de dados (treinamento, teste e validação) pudessem influenciar a escolha do teste que apresentou melhor desempenho, optou-se por realizar, inicialmente, três simulações distintas para cada teste. Após definir o melhor, foram realizadas 10 simulações para ele.

A Tabela 3, a seguir, ilustra os testes realizados. Em todos os casos, foram fornecidos como valores conhecidos de referência (*target*) para a rede neural os valores de concentração integrada na direção transversal ao vento e normalizadas pela taxa de emissão observados durante os experimentos de campo (10^{-4} s/m²). Em cada teste, foram alteradas as variáveis utilizadas como dado de entrada da rede:

C_{prev} que corresponde à concentração integrada na direção transversal ao vento e normalizada pela taxa de emissão prevista pelo MODELAR (10^{-4} s/m²); a medida de temperatura do ar próximo à superfície, indicada por $tztc$ (°C); $htztc$ que é a altura na qual a temperatura foi medida (m); hs que é a altura da fonte (m); z_0 que é a altura de rugosidade aerodinâmica (m); hbl que é a altura da camada limite (m); u_* que é a velocidade de atrito (m/s); L que é o comprimento de Monin-Obukhov, d que representa a distância entre a fonte de emissão e o ponto de interesse (km); θ_* que é a escala característica de temperatura (°C); e, finalmente, w_* representa a escala convectiva de velocidade (m/s).

É importante ressaltar que w_* só pode ser calculado nos casos em que $L < 0$, sendo assim, o Teste 10 (único teste que contém w_*) foi realizado apenas para o conjunto dos casos dados neutros e instáveis. Para os casos de estabilidade atmosférica neutra em que $0 \leq z/L \leq 1$, arbitrou-se como valor padrão $w_* = 1$.

Tabela 3 - Testes com diferentes variáveis como dados de entrada da rede neural

	Variáveis										
	C_{prev}	$tztc$	$htztc$	hs	z_0	hbl	u_*	L	d	θ_*	w_*
Teste 01	x	x	x	x	x	x	x	x	x		
Teste 02	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
Teste 03	x	x		x	x	x	x	x	x		
Teste 04	x			x	x	x	x	x	x		
Teste 05	x	x	x	x	x	x	x		x	x	
Teste 06	x	x	x	x	x	x	x		x		
Teste 07	x	x	x		x	x	x	x	x		
Teste 08	x	x	x	x		x	x	x	x		
Teste 09	x			x		x	x	x	x		
Teste 10	X	x	x	x	x	x	x		x	x	x

Ao definir os testes a serem realizados, levou-se em consideração a análise de sensibilidade do MODELAR realizada por Conte (2013) que conclui que as variáveis de maior influência na qualidade dos resultados previstos para o modelo em questão são a velocidade de atrito e a altura da camada limite.

Os testes iniciais foram realizados para os cenários de estabilidade atmosférica estável e observou-se uma melhora bastante significativa na qualidade

das previsões quando da aplicação da rede neural. Porém, no conjunto dos casos de estabilidade atmosférica neutra e instável a aplicação da rede não representou melhoras significativas na qualidade das simulações, em especial nos casos em que as concentrações observadas eram de valores maiores. Na busca de uma solução para o problema, foi observado que os casos neutros e instáveis apresentavam uma maior distribuição dos valores de concentração em comparação com os dados estáveis. Enquanto nos casos estáveis as concentrações observadas variavam entre 0,002 e 340,4 ($\times 10^{-4}$) s/m², nos casos neutros e instáveis as concentrações variavam entre 0,0215 e 2626,39 ($\times 10^{-4}$) s/m². Além disso, em ambos os cenários, a distribuição dos dados é bastante heterogênea, com muitas ocorrências de concentrações de valores mais baixos e poucas ocorrências de concentrações maiores. Esta discrepância é facilmente observada nas Figuras 10 (a) e 11 (a), onde estão representados os histogramas de concentração integrada observadas nos diversos experimentos e separadas por condição de estabilidade.

Com o intuito de homogeneizar a distribuição dos dados e diminuir a amplitude dos mesmos, estudou-se a possibilidade de aplicar o logaritmo natural tanto aos dados de concentração simulados pelo MODELAR, que é um dos dados de entrada da rede neural, quanto aos dados de concentração observados durante os experimentos, que são apresentados para a rede na forma de alvo (*target*).

Com isso, os dados referentes ao cenário de estabilidade estável passam a variar entre -6,24 e 5,83 ($\times 10^{-4}$) s/m² e os dados referentes ao conjunto de atmosfera neutra e instável ficam entre -3,84 e 7,87 ($\times 10^{-4}$) s/m². Essa mudança permitiu à rede trabalhar com uma faixa de valores mais restrita e com uma distribuição mais próxima da distribuição normal, facilitando o processamento dos dados por parte da rede neural. As Figuras 10 (b) e 11 (b) apresentam os histogramas para o logaritmo natural dos dados de concentração observada. Fica bastante clara a melhora na distribuição dos dados.

É importante ressaltar que os valores corrigidos pela rede ficam no seguinte formato: $\ln(C_c)$, em que C_c é a concentração integrada na direção transversal ao vento e normalizada pela taxa de emissão corrigida pela rede neural. Como C_c é a variável de interesse, é necessário aplicar o antilogaritmo aos valores de saída da rede a fim de se obter os valores de concentração desejados.

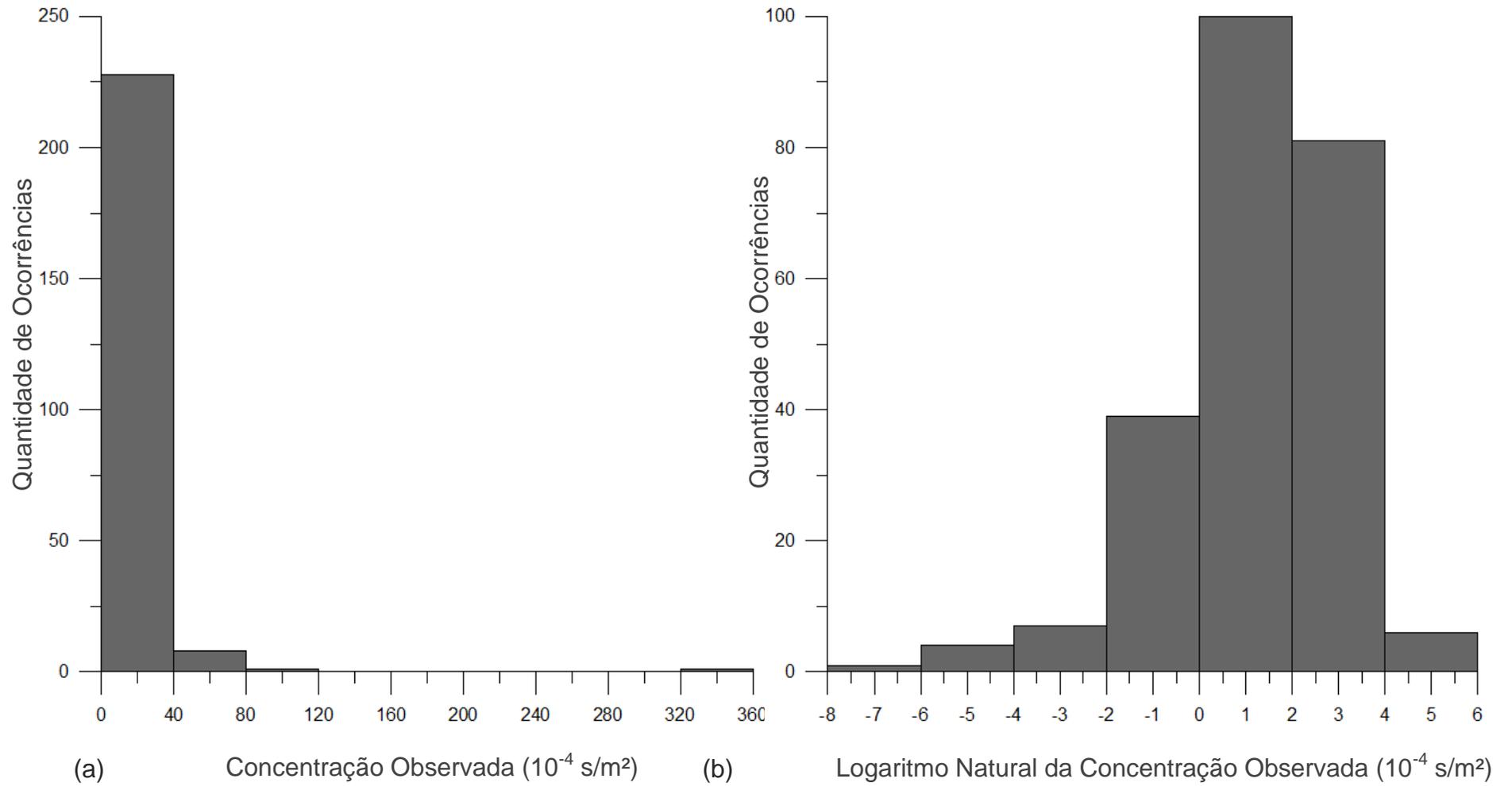


Figura 10 - Histogramas da distribuição dos dados de concentração observada (a) e do logaritmo natural das concentrações observadas (b) para os dados estáveis.

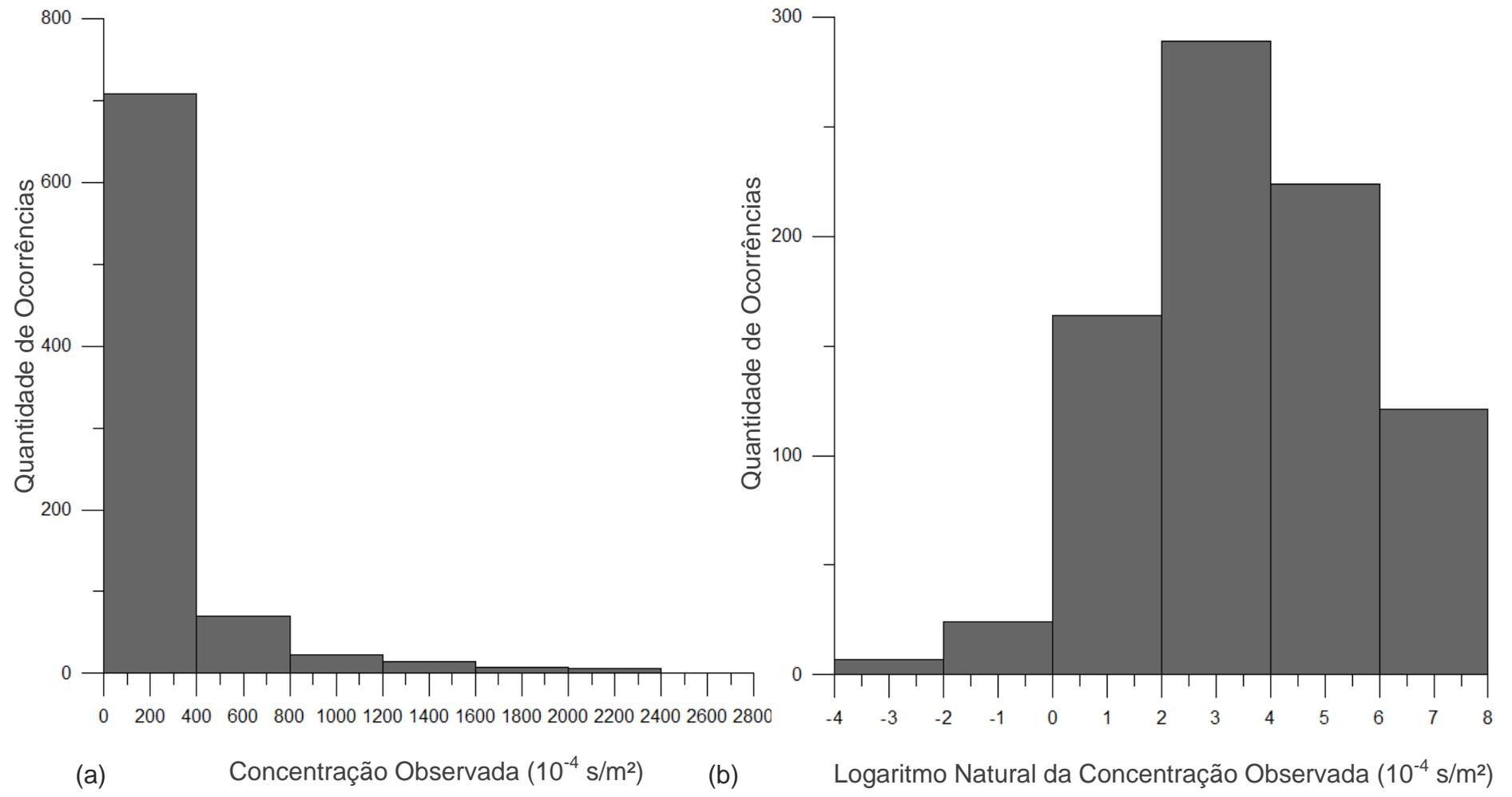


Figura 11 - Histogramas da distribuição dos dados de concentração observada (a) e do logaritmo natural das concentrações observadas (b) para os dados neutros e instáveis.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 CASOS DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA ESTÁVEL

4.1.1 Casos de estabilidade atmosférica estável sem aplicação da transformação logarítmica

Como supracitado, inicialmente as simulações para o cenário de atmosfera estável foram realizadas utilizando as concentrações observadas e previstas pelo MODELAR sem aplicar o logaritmo natural. Em algumas simulações foram observados valores corrigidos negativos que se mostraram persistentes mesmo com variações na configuração da rede. Tal comportamento indesejado já foi observado em outros estudos que aplicaram redes neurais a modelos de dispersão (PELLICCIONI, TIRABASSI, 2006; PELLICCIONI, TIRABASSI, GARIAZZO, 2003a e 2003b) e não tem representação física, já que não existem concentrações negativas.

Em todas as simulações, o emprego da rede neural artificial foi capaz de melhorar significativamente os resultados das previsões, porém, o Teste 01 com 15 neurônios na camada oculta foi o que apresentou melhores resultados, aprimorando significativamente os parâmetros estatísticos, além de apresentar poucos casos de dados negativos. Das 10 simulações realizadas, 5 apresentaram dados negativos (Simulação 03, 04, 05, 07 e 08). O caso em que os valores negativos foram mais significativos foi a Simulação 05 em que 3 dos 38 dados resultaram negativos, o que equivale a 7,89% do total.

A Tabela 4 traz os casos em que foram geradas concentrações negativas após a correção com a rede neural, confrontando as concentrações reais observadas com os valores corrigidos pela rede.

É possível observar que os casos negativos correspondem a baixos valores de concentração observada (abaixo de $5,527 \times 10^{-4}$ s/m²), o que indica uma dificuldade da rede em lidar com concentrações muito pequenas. Optou-se, então,

por transformar os valores negativos em concentrações nulas. Tal mudança teve efeitos mínimos ao se determinar a média dos parâmetros estatísticos para o Teste 01 (variações máximas na ordem de 0,01).

Tabela 4 - Concentrações negativas presentes nas simulações do Teste 01 (Cenário de estabilidade atmosférica estável sem a aplicação da transformação logarítmica)

Teste 01					
Simulação 03		Simulação 04		Simulação 05	
Observado ($\times 10^{-4}$ s/m ²)	Corrigido pela rede ($\times 10^{-4}$ s/m ²)	Observado ($\times 10^{-4}$ s/m ²)	Corrigido pela rede ($\times 10^{-4}$ s/m ²)	Observado ($\times 10^{-4}$ s/m ²)	Corrigido pela rede ($\times 10^{-4}$ s/m ²)
2,034	-7,833	2,562	-1,520	2,034	-2,179
1,459	-2,766	0,492	-0,577	5,527	-4,796
0,319	-3,640			0,453	-5,079
Simulação 07		Simulação 08			
Observado ($\times 10^{-4}$ s/m ²)	Corrigido pela rede ($\times 10^{-4}$ s/m ²)	Observado ($\times 10^{-4}$ s/m ²)	Corrigido pela rede ($\times 10^{-4}$ s/m ²)		
0,492	-8,035	0,492	-8,299		
0,080	-1,391	2,582	-0,107		

A Tabela 5 apresenta a média dos parâmetros estatísticos para todas as simulações do Teste 01, comparando o desempenho das previsões realizadas apenas pelo MODELAR com os resultados corrigidos pela rede neural artificial. Estes valores foram calculados considerando os valores negativos como zero. Os valores de \overline{FB} e $Fac2$ (%), após o emprego da rede, ficaram dentro dos limites tidos como aceitáveis. Tanto a correlação (R) quanto o $NMSE$, tiveram uma melhora bastante acentuada. A primeira passou de -0,0611 para 0,5142, com o uso da rede, já o $NMSE$ passou de 388,72 para 1,92. Por sua vez, o $Fac2$ (%) passou de 10,48% para 50,54%. Ao longo das simulações, foram considerados 372 dados dos quais apenas 12 foram negativos, o que representa apenas 3,2% do total. Em todos os casos as estatísticas apontam um desempenho muito superior quando os resultados previstos pelo MODELAR são corrigidos pela rede neural.

Tabela 5 - Média dos parâmetros estatísticos de todas as simulações realizadas para o Teste 01 (Cenário de estabilidade atmosférica estável sem a aplicação da transformação logarítmica)

	Teste 01	
	MODELAR	MODELAR E RNA
\overline{FB}	-1.7280	-0.1149
\overline{FS}	-1.8549	0.3699
\overline{R}	-0.0611	0.5142
\overline{NMSE}	388.7294	1.9217
Fac2	39	188
Fac2 (%)	10.48	50.54
Total de dados: 372		
Dados negativos: 12		

4.1.2 Casos de estabilidade atmosférica estável com a transformação logarítmica

Em um segundo momento das simulações dos casos estáveis, optou-se por apresentar à rede não os valores de concentrações reais observadas e de concentrações simuladas pelo MODELAR, mas seus logaritmos naturais. Como já discutido na seção 3.7, tal artifício permite que a rede trabalhe com uma faixa de valores mais restrita, o que facilita a correção de valores extremos.

Foram realizados os Testes 01 a 09 (Tabela 3), sendo o Teste 06 com 10 neurônios na camada oculta o que apresentou melhores resultados. Para este teste não foram utilizadas como dados de entrada da rede as variáveis: comprimento de Monin-Obukhov (L) e escala característica de temperatura (θ_*). É importante ressaltar que não se utilizou a escala convectiva de velocidade (w_*) nas simulações dos casos estáveis, pois tal variável só pode ser determinada quando $L < 0$. A Figura 12 traz uma representação gráfica da rede neural artificial que apresentou melhor desempenho para os casos estáveis.

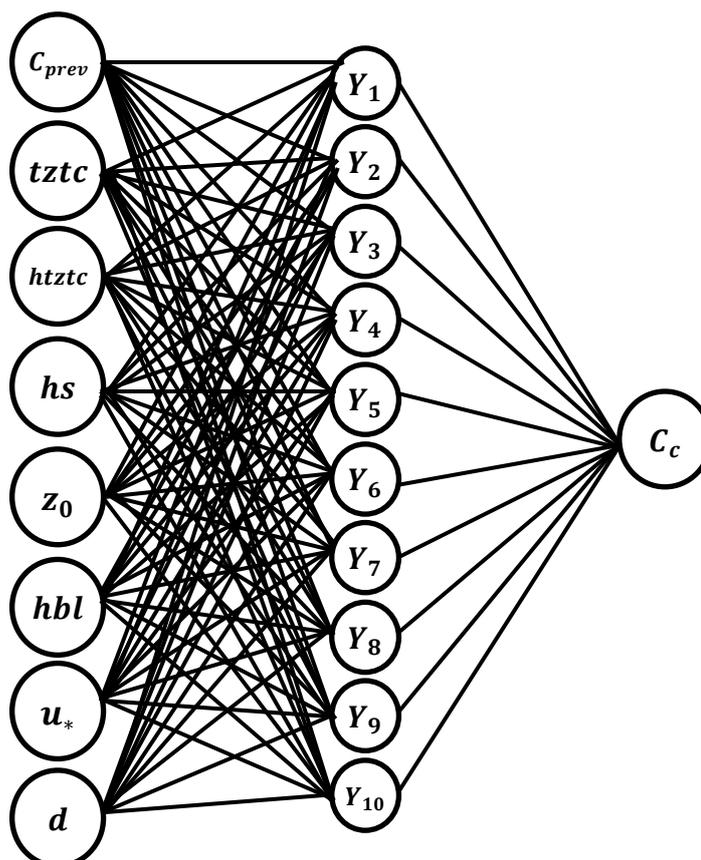


Figura 12 - Representação gráfica da rede neural artificial utilizada nos casos estáveis

A Tabela 6 traz as estatísticas, antes e depois do uso da rede neural, para as 10 simulações realizadas para o teste escolhido. Fica evidente que absolutamente todos os parâmetros estatísticos apresentaram valores significativamente melhores com o emprego da rede neural. No caso do *FB*, as Simulações 05 e 08 (-0,04 e -0,03 respectivamente) ficaram, após a correção realizada pela rede, com valores muito próximos de zero, valor tido como ideal. O mesmo ocorreu com *FS* nas Simulações 03 e 07 (-0,015 e 0,087). A correlação apresentou melhoras muito significativas. No caso da Simulação 08, por exemplo, passou de 0,008 para 0,835. Na Simulação 04 passou de -0,021 para 0,845. O menor valor de correlação, após o emprego da rede, ocorreu na Simulação 10 quando *R* passou de -0,026 para 0,521.

Tabela 6 - Estatísticas das 10 simulações realizadas para o Teste 06 para os casos estáveis aplicando-se o logaritmo natural

	Simulação 01		Simulação 02		Simulação 03		Simulação 04		Simulação 05	
	MODELAR	MODELAR E RNA								
FB	-1.744	0.104	-1.542	0.356	-1.654	0.110	-1.952	-0.855	-1.686	-0.041
FS	-1.863	-0.117	-1.632	0.279	-1.866	-0.015	-1.966	-1.071	-1.806	0.107
R	-0.181	0.594	-0.043	0.814	-0.114	0.651	-0.021	0.845	-0.047	0.846
NMSE	97.449	0.582	29.113	0.380	146.478	0.486	737.279	2.000	85.212	0.220
Fac2	3	18	4	20	5	23	1	15	3	23
Fac2 (%)	9.7	58.1	11.8	58.8	12.8	59.0	3.8	57.7	7.9	60.5
	31 dados na amostra		34 dados na amostra		39 dados na amostra		26 dados na amostra		38 dados na amostra	

	Simulação 06		Simulação 07		Simulação 08		Simulação 09		Simulação 10	
	MODELAR	MODELAR E RNA								
FB	-1.780	0.164	-1.900	0.152	-1.602	-0.033	-1.895	0.448	-1.665	-0.225
FS	-1.917	0.441	-1.967	0.087	-1.818	-0.114	-1.943	0.585	-1.774	-0.133
R	-0.060	0.728	-0.057	0.686	0.008	0.835	-0.102	0.680	-0.026	0.521
NMSE	731.724	0.638	600.371	0.446	78.580	0.238	722.075	0.984	61.292	0.907
Fac2	3	20	4	21	4	17	5	21	2	20
Fac2 (%)	8.3	55.6	11.1	58.3	12.5	53.1	13.2	55.3	5.9	58.8
	36 dados na amostra		36 dados na amostra		32 dados na amostra		38 dados na amostra		34 dados na amostra	

As Simulações 04, 06, 07 e 08 apresentaram valores muito altos para o $NMSE$, sendo eles: 737, 731, 600 e 722, respectivamente. Porém a rede foi capaz de diminuir este erro de forma bastante acentuada, após a sua aplicação esses valores baixaram, respectivamente, para: 2,0; 0,638; 0,446 e 0,984. Por fim, a rede se mostrou bastante eficaz ao melhorar os resultados para o fator de dois ($Fac2$). No caso da Simulação 04, ele passou de 3,8% para 57,7%. Em todas as simulações o $Fac2$, para as concentrações corrigidas pela rede, ficou acima de 53%, chegando a alcançar 60,5% na Simulação 05. Ou seja, o emprego da rede neste caso específico garantiu que todas as simulações ficassem dentro do intervalo considerado como bom para o $Fac2$ ($Fac2 (\%) \geq 50\%$). Para termos uma melhor compreensão do progresso obtido através do emprego da rede neural, a Tabela 7 traz a média dos parâmetros estatísticos para todas as simulações do Teste 06, comparando o desempenho das previsões realizadas apenas pelo MODELAR com os resultados corrigidos pela rede neural artificial.

Nas simulações realizadas pelo MODELAR, o \overline{FB} foi de -1,742, fora do intervalo estipulado como bom ($-0,3 < FB < 0,3$). Já com o uso da rede neural, esse parâmetro caiu para 0,018, ou seja, muito próximo de zero que é o valor tido como ideal. O fato de \overline{FB} ter um valor pequeno e positivo, após o emprego da rede, indica uma pequena tendência das previsões subestimarem as concentrações reais observadas. O valor de \overline{FS} caiu de -1,855 para 0,005, com o emprego da rede, valor novamente muito próximo de zero tido como ideal. Por sua vez, a correlação passou de apenas -0,064 para 0,720. O \overline{NMSE} apresentou uma redução bastante significativa após o uso da rede neural, passou de 328,957 para 0,688, valor próximo ao tido como bom ($NMSE \leq 0,5$). Por fim, o fator de dois deixa ainda mais evidente os avanços alcançados com a utilização da rede neural. Nas simulações realizadas apenas pelo MODELAR, somente 9,9% dos valores previstos estavam dentro do intervalo delimitado pelo fator de dois, no entanto esse percentual subiu para 57,6% com a rede neural, satisfazendo mais um dos critérios que indicam o bom desempenho das previsões ($Fac2 \geq 50\%$).

Ao compararmos os valores apresentados pela Tabela 5 e Tabela 7, podemos perceber que o emprego da transformação logarítmica foi capaz de melhorar todos os parâmetros estatísticos. Sendo assim, o uso do logaritmo natural

não só eliminou os casos de dados negativos como também melhorou a qualidade das previsões.

Tabela 7 - Média dos parâmetros estatísticos de todas as simulações realizadas para o Teste 06 (Cenário de estabilidade atmosférica estável com a aplicação da transformação logarítmica)

	Teste 06	
	MODELAR	MODELAR E RNA
\overline{FB}	-1.742	0.018
\overline{FS}	-1.855	0.005
\overline{R}	-0.064	0.720
\overline{NMSE}	328.957	0.688
Fac2	34	198
Fac2 (%)	9.9	57.6
Total de dados: 344		

Os diagramas de dispersão nos permitem melhor visualizar os efeitos da correção realizada pela rede. A Figura 13, a seguir, apresenta o diagrama de dispersão para a Simulação 01 do Teste 06. No Apêndice A do presente documento, é possível ver os demais diagramas para as Simulações 02 a 10. Considerando a significativa amplitude na qual as concentrações estão distribuídas, optou-se por apresentar o diagrama com os eixos em escala logarítmica. Caso o modelo fosse perfeito, os pontos deveriam estar dispostos sobre a linha contínua grossa, que indica quando a concentração prevista é igual à observada. Os dados que se encontram entre as linhas pontilhadas cinzas estão dentro do intervalo delimitado pelo fator de dois.

Apesar de em alguns casos o MODELAR subestimar os valores reais observados, a tendência mais acentuada do modelo é de superestimar esses valores. Tal característica fica evidenciada pela maior concentração de pontos azuis (que representam as simulações realizadas pelo MODELAR) na área abaixo da diagonal principal, região em que os valores de concentração previstos são maiores que os valores reais observados. Além disso, o valor negativo do desvio fracional

médio ($\overline{FB} = -1,728$) corrobora a tendência do modelo em superestimar os valores reais observados para a maior parte dos casos estudados.

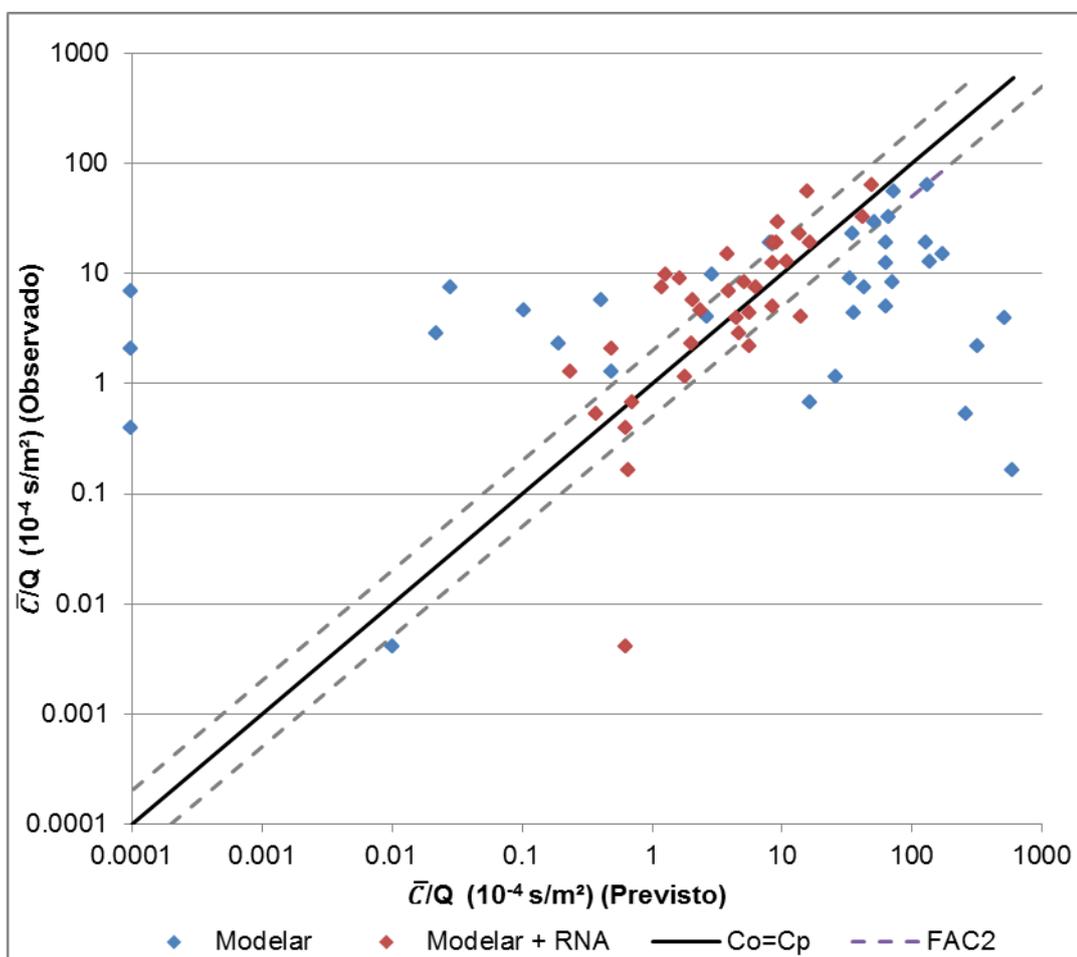


Figura 13 - Diagrama de dispersão para a Simulação 01 do Teste 06 para os casos estáveis

As simulações realizadas pelo MODELAR, em azul, aparecem de maneira dispersa ao longo da área do gráfico, em contrapartida é evidente a tendência dos pontos em vermelho, que representam as concentrações corrigidas pela rede, de se aglomerarem ao redor da diagonal principal e de estarem, na sua maioria, circunscritos no espaço correspondente ao fator de dois. Assim fica visualmente evidente a evolução da acurácia das previsões quando da aplicação da rede neural.

4.2 CASOS DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA NEUTRA E INSTÁVEL

4.2.1 Casos de estabilidade atmosférica neutra e instável sem aplicação da transformada logarítmica

Ao realizar os testes para o conjunto dos cenários de atmosfera neutra e instável, não se observou melhoras consideráveis nas simulações após o emprego da rede neural. Ficou clara também a incapacidade da mesma em lidar com as concentrações de valores mais altos. Ao se tentar compreender as causas do problema, foi possível perceber que a distribuição muito heterogênea dos valores de concentração é mais acentuada no conjunto dos casos neutros e instáveis. Há uma grande quantidade de casos de concentrações pequenas e casos mais raros de concentrações maiores, além disso, a amplitude dos dados também é bastante expressiva, variando entre 0,0215 e 2626,39 ($\times 10^{-4}$) s/m². Para contornar o problema, optou-se por aplicar uma transformação logarítmica aos dados de concentração observados (dados de entrada da rede) e aos dados de concentrações previstas pelo MODELAR (*target*), como descrito na seção 3.7.

Como as simulações para os casos neutros e instáveis sem a aplicação da transformada logarítmica não apresentou resultados conclusivos, optou-se por apresentar e discutir apenas os casos em que a transformada logarítmica foi utilizada.

4.2.2 Casos de estabilidade atmosférica neutra e instável com a aplicação da transformada logarítmica

Para o conjunto dos casos neutros e instáveis foram realizados os Testes 01 a 10 da Tabela 3, sendo que o Teste 05 com 15 neurônios na camada oculta

apresentou o melhor desempenho. Para este teste não se utilizou como dado de entrada da rede neural o comprimento de Monin-Obukhov (L) e a escala convectiva de velocidade (w_*). A Figura 14 apresenta uma representação gráfica da rede neural artificial empregada.

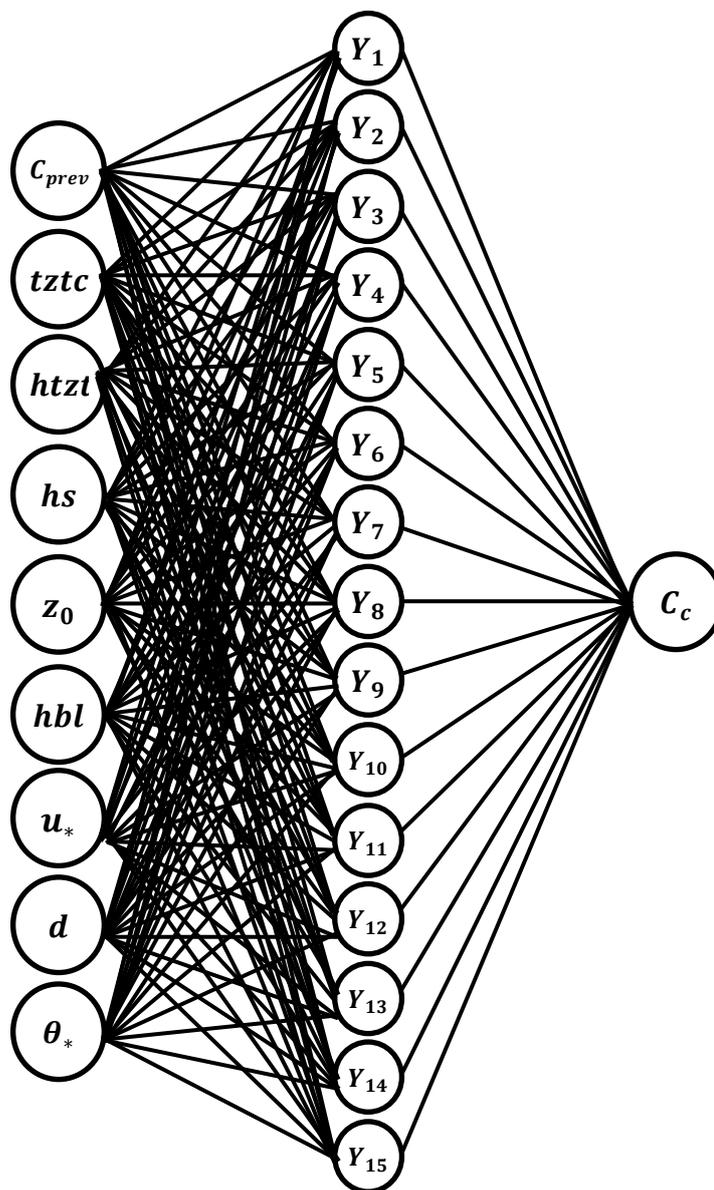


Figura 14 - Representação gráfica da rede neural artificial utilizada no conjunto dos casos neutros e instáveis

A Tabela 8 apresenta as 10 simulações realizadas para o teste em questão. É possível perceber que as simulações realizadas apenas pelo MODELAR

apresentam um desempenho estatístico muito superior para o conjunto dos casos neutros e instáveis em comparação com as simulações realizadas para os casos estáveis. Mesmo assim, a rede foi capaz de tornar tais previsões mais acuradas melhorando significativamente todos os parâmetros estatísticos analisados.

Em todas as simulações, o *FB* após a utilização da rede ficou dentro do limiar compreendido entre -0,3 e 0,3, com destaque para a Simulação 08 em que *FB* passou de -0,990 para 0,004. No caso do parâmetro *FS*, a Simulação 01 foi a que apresentou uma variação mais acentuada passando de -1,336 para 0,077. A correlação ao se aplicar a rede neural ficou acima de 0,9 em quase todas as simulações, sendo as exceções as Simulações 04 e 08. A maior correlação observada foi de 0,965 na Simulação 05. Os valores de *NMSE* para as simulações do MODELAR nos casos neutros e instáveis foram módicos quando comparados aos valores dos casos estáveis. A maior variação ocorreu na Simulação 04 em que o *NMSE* passou de 6,846 antes da aplicação da rede para 0,603. O menor valor observado foi de 0,064 na Simulação 02. Por fim, o fator de dois teve sua maior variação na Simulação 07, em que passou de 49,2% para 81,3% com a utilização da rede neural. O maior valor de *Fac2* (%) ocorreu na Simulação 01, para a qual o valor passou de 57,5% para 85,0% por meio das correções realizadas pela rede.

Tabela 8 - Estatísticas das 10 simulações realizadas para o Teste 05 para os casos neutros e instáveis aplicando-se o logaritmo natural

	Simulação 01		Simulação 02		Simulação 03		Simulação 04		Simulação 05	
	MODELAR	MODELAR E RNA								
FB	-0.948	0.036	-0.776	-0.017	-0.559	0.180	-1.171	-0.251	-0.593	0.124
FS	-1.336	0.077	-1.116	-0.089	-0.956	0.328	-1.508	-0.484	-0.839	0.163
R	0.732	0.939	0.852	0.963	0.883	0.954	0.747	0.822	0.907	0.965
NMSE	4.630	0.112	2.097	0.064	1.439	0.174	6.846	0.603	1.016	0.082
Fac2	73	108	53	85	76	105	57	93	72	102
Fac2 (%)	57.5	85.0	52.5	84.2	58.9	81.4	49.1	80.2	50.7	71.8
	127 dados na amostra		101 dados na amostra		129 dados na amostra		116 dados na amostra		142 dados na amostra	

	Simulação 06		Simulação 07		Simulação 08		Simulação 09		Simulação 10	
	MODELAR	MODELAR E RNA								
FB	-0.874	0.040	-0.628	0.134	-0.990	0.004	-0.735	0.136	-0.716	0.121
FS	-1.172	0.083	-0.954	0.114	-1.458	-0.181	-0.991	0.349	-1.011	0.238
R	0.845	0.936	0.775	0.927	0.683	0.889	0.845	0.921	0.909	0.943
NMSE	2.554	0.115	1.653	0.124	6.251	0.210	1.720	0.248	1.520	0.142
Fac2	66	97	63	104	70	95	61	101	56	84
Fac2 (%)	49.3	72.4	49.2	81.3	55.1	74.8	46.6	77.1	50.0	75.0
	134 dados na amostra		128 dados na amostra		127 dados na amostra		131 dados na amostra		112 dados na amostra	

A Tabela 9 apresenta as médias das estatísticas para todas as 10 simulações realizadas. Tanto \overline{FB} quanto \overline{FS} ficaram com valores muito próximos de zero (0,051 e 0,060 respectivamente). A correlação média que já era boa (0,818) ficou ainda melhor após a utilização da rede, indo para 0,926. O \overline{NMSE} das simulações realizadas apenas pelo MODELAR foi de 2,973 (valor bem menor que nos casos estáveis) e passou para 0,187 com a aplicação da rede, ou seja, ficou dentro do intervalo considerado como bom ($NMSE \leq 0,5$) e próximo de zero, valor tido como ideal. No caso do fator de dois, mesmo antes da aplicação da rede, ele já apresentava um valor acima do limiar que define um bom desempenho ($Fac2 \geq 50\%$), mas a rede novamente foi capaz de aperfeiçoar significativamente a acurácia das previsões chegando a um fator de dois de 78,1%.

Tabela 9 - Média dos parâmetros estatísticos de todas as simulações realizadas para o Teste 05 (Cenário de estabilidade atmosférica neutra e instável com a aplicação da transformação logarítmica)

	Teste 05	
	MODELAR	MODELAR E RNA
\overline{FB}	-0.799	0.051
\overline{FS}	-1.134	0.060
\overline{R}	0.818	0.926
\overline{NMSE}	2.973	0.187
Fac2	647	974
Fac2 (%)	51.9	78.1
Total de dados: 1247		

A Figura 15 traz o diagrama de dispersão para a Simulação 01 do Teste 06 para os casos neutros e instáveis. No Apêndice B do presente documento, estão os demais diagramas para as Simulações 02 a 10.

Assim como ocorreu no caso estável, os diagramas de dispersão para o conjunto dos casos neutros e instáveis refletem visualmente o aperfeiçoamento na qualidade das previsões quando corrigidas pela rede neural. Novamente os pontos em azul se encontram mais espalhados pela área do gráfico, enquanto os pontos em

vermelho, que representam as concentrações corrigidas pela rede neural, estão mais propensos a convergir para a área delimitada pelo fator de dois (graficamente delimitada pelas linhas pontilhadas). Do mesmo modo, as concentrações simuladas pelo MODELAR tendem a ocupar a área inferior do gráfico, evidenciando a tendência do modelo em superestimar as concentrações reais observadas.

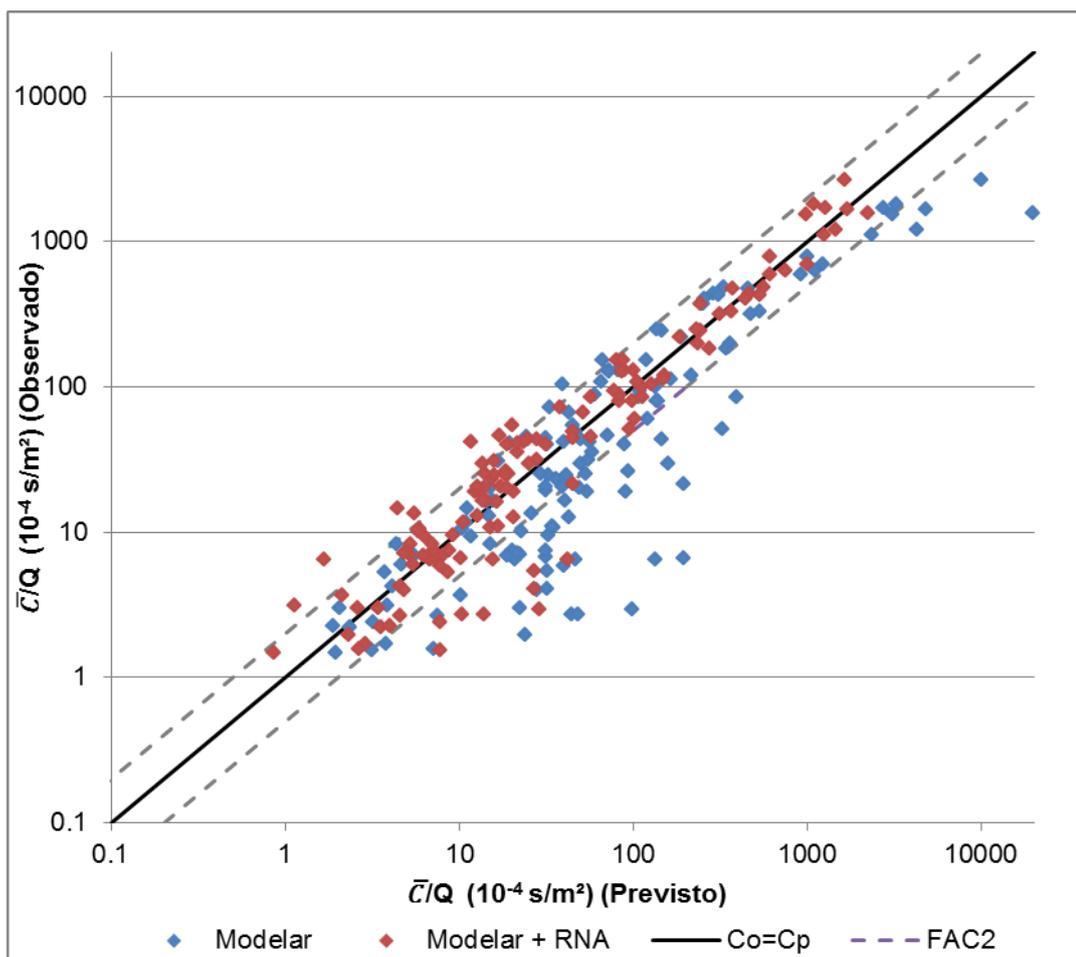


Figura 15 - Diagrama de dispersão para a Simulação 01 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis

Ao considerarmos as simulações mais bem sucedidas (Teste 06 nos casos estáveis com a aplicação da transformada logarítmica e Teste 05 no conjunto dos casos neutros e instáveis também com a aplicação da transformada), podemos perceber que o comprimento de Monin-Obukhov e a escala convectiva de velocidade não foram variáveis relevantes para o treinamento e operação da rede.

Por outro lado, a escala característica de temperatura se mostrou importante apenas nos casos neutros e instáveis. Outras variáveis como a altura de emissão, a concentração prevista pelo MODELAR, a temperatura do ar, a altura em que a temperatura do ar foi medida, a altura de rugosidade aerodinâmica, a altura da camada limite, a velocidade de atrito e a distância entre o ponto de interesse e a fonte de emissão foram fundamentais para o melhor desempenho da rede neural independente da classe de estabilidade.

Tipicamente o MODELAR apresenta um desempenho muito inferior nos casos estáveis. Tal característica fica evidente ao analisarmos a grande discrepância dos valores médios dos parâmetros estatísticos entre o caso estável (Tabela 7) e o conjunto dos casos neutros e instáveis (Tabela 9). Por exemplo, no caso estável a correlação para as simulações do MODELAR foi de apenas -0,064, enquanto nos casos neutros e instáveis foi de 0,818, valor tido como bom. O fator de dois para as previsões do MODELAR foi de apenas 9,9% nos casos estáveis, mas o mesmo parâmetro para os casos neutros e instáveis foi de 51,9%.

A aplicação da rede neural para os casos estáveis foi capaz de melhorar muito significativamente a qualidade das previsões, a pequena correlação de -0,064 passou para 0,720, enquanto o fator de dois passou de apenas 9,9% para 57,6%, valor tido como aceitável. Ou seja, a melhora na qualidade dos resultados foi bastante acentuada. Para os casos neutros e instáveis, as simulações realizadas apenas pelo MODELAR resultaram muito mais satisfatórias, mas mesmo assim a aplicação da rede neural foi capaz torná-las ainda mais confiáveis melhorando de forma bastante significativa os parâmetros estatísticos. A título de exemplo, a correlação passou de 0,818 para 0,926, enquanto o fator de dois passou de 51,9% para 78,1%. Sendo assim, a rede é capaz de melhorar de forma muito significativa o baixo desempenho das previsões do MODELAR para os casos estáveis e ainda é capaz de melhorar ainda mais as já razoáveis previsões dos casos neutros e instáveis.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho, avaliou-se o emprego de redes neurais artificiais como uma forma de pós-processamento capaz de tornar mais acuradas e, portanto, mais confiáveis as previsões de concentração de poluição atmosférica geradas pelo modelo de dispersão MODELAR. Para tanto, foram treinadas duas redes do tipo *perceptron* multicamadas por meio do algoritmo *backpropagation*, uma a ser aplicada aos casos estáveis e a outra ao conjunto dos casos neutros e instáveis. Os dados utilizados para as fases de treinamento, teste e validação das redes neurais artificiais são oriundos de experimentos de dispersão atmosféricas já consagrados na literatura. São eles: Copenhagen, Cabauw, Hanford 64, Hanford 67, Hanford 83, Lillestrom, Prairie Grass.

Os resultados aqui apresentados evidenciam uma melhora bastante acentuada das previsões realizadas mediante o emprego da rede neural artificial, corroborando a aplicabilidade das redes neurais em associação com os modelos de dispersão atmosférica.

Nos dois cenários estudados, casos estáveis e conjunto dos casos neutros e instáveis, a rede foi capaz de melhorar as previsões, apresentando um visível aprimoramento na distribuição dos dados previstos, bem como uma melhora relevante nos parâmetros estatísticos analisados. Ao contrário dos trabalhos semelhantes encontrados na literatura (PELLICCIONI, TIRABASSI, 2006; PELLICCIONI, TIRABASSI, GARIAZZO, 2003a e 2003b), as redes neurais artificiais aqui empregadas foram capazes de trabalhar com dados diversos oriundos de diferentes experimentos não estando, portanto, especializadas em determinadas configurações atmosféricas e espaciais, o que torna sua aplicabilidade mais abrangente. Além disso, o emprego da transformada logarítmica, característica *sui generis* da metodologia aqui desenvolvida, garante que não haja o aparecimento de concentrações negativas como ocorre nos trabalhos já citados, além de fornecer valores corrigidos mais acurados em comparação aos valores obtidos quando a transformada não é aplicada.

Os melhores resultados obtidos para os casos estáveis ocorreram ao se empregar uma rede neural com 8 neurônios na camada de entrada e 10 neurônios na camada de oculta. As variáveis que se mostraram mais relevantes como dado de entrada da rede foram: a concentração prevista pelo MODELAR, um valor de temperatura do ar, a altura em que essa temperatura foi medida, a altura de emissão, a altura de rugosidade aerodinâmica, a altura da camada limite, a velocidade de atrito e a distância entre o ponto de interesse e a fonte. Com a aplicação da rede neural artificial, o fator de dois passou de apenas 9,9% para 57,6%, enquanto o desvio fracional médio passou de -1,742 para 0,018 e o erro quadrático médio passou de 328,9 para 0,688.

Para o conjunto dos casos neutros e instáveis, os melhores resultados foram obtidos para uma rede neural com 9 neurônios na camada de entrada e 15 neurônios na camada oculta. As variáveis mais relevantes como dado de entrada da rede foram as mesmas do caso estável mais a escala característica de temperatura. Com a aplicação da rede neural artificial o fator de dois passou de 51,9% para 78,1%, enquanto o desvio fracional médio passou de -0,799 para 0,051 e o erro quadrático médio passou de 2,973 para 0,187.

É preciso destacar que, tanto nos casos estáveis quanto no conjunto dos casos neutros e instáveis, absolutamente todos os parâmetros estatísticos tiveram valores consideravelmente melhores com a aplicação da rede neural.

A tendência das previsões realizadas pelo MODELAR é de apresentar bons resultados para os casos neutros e instáveis. Mesmo assim, a rede ainda consegue melhorar significativamente tais previsões. Por outro lado, o desempenho do MODELAR nos casos estáveis é muito inferior, mas o emprego da rede neural foi capaz de melhorar de forma bastante acentuada a acurácia dessas previsões, trazendo-as a um novo patamar.

É importante salientar que o emprego de métodos de pós-processamento tem como objetivo tentar resolver de forma imediata um problema que se apresenta. Não sendo, portanto, um método definitivo, mas sim uma ferramenta útil até que haja um avanço expressivo no estado da arte da modelagem de dispersão atmosférica capaz de tornar os modelos mais acurados.

No que tange aos objetivos que foram inicialmente estipulados, podemos considerá-los cumpridos, tendo em vista que a base de dados levantada possibilitou o correto treinamento da rede, bem como apresentou uma variedade de dados capazes de representar diversas características atmosféricas sem especializar a rede em casos específicos. Além disso, foi possível estabelecer quais dados de entrada são mais relevantes a fim de se obter os melhores resultados e qual a topologia da rede que melhor se adequa ao problema.

Por fim, sugere-se, para trabalhos futuros, a aplicação da metodologia aqui desenvolvida em outros modelos de dispersão atmosférica, bem como a utilização de outros tipos de redes neurais artificiais com o intuito de avaliar se é possível melhorar ainda mais as correções das previsões.

REFERÊNCIAS

AGTERBERG, R.; NIEUWSTADT, F. T. M.; van DUUREN, H.; HASSELTON, A. J.; KRIJT, G. D. **Dispersion experiments with sulphur hexafluoride from the 213m high meteorological mast at Cabauw in the Netherlands**, 1983. 130 p. Relatório Técnico.

AL-ALAWI, S. M.; AL-HINAI, A. An ANN-based approach for predicting global radiation in locations with no direct measurement instrumentation. **Renewable Energy**, vol. 14, n.1-4, p. 199-204, 1998.

AMERICAN METEOROLOGICAL SOCIETY (AMS) **Glossary of meteorology**. Disponível em: <glossary.ametsoc.org>. Acesso em: 02/12/2014.

ARMANI, F. A. S.; ALMEIDA, R. C.; DIAS, N. L. C. Statistical evaluation of a new air dispersion model against AERMOD using the Prairie Grass data set. **Journal of the Air & Waste Management Association**, vol. 64, n. 2, p. 219-226, 2014.

ARYA, S. P. **Air pollution meteorology and dispersion**. 1.ed. New York: Oxford University Press, 1999.

ARYA, S. P. **Introduction to Micrometeorology**, Academic Press, 1988.

BARAD, M. L. **Project Prairie Grass, A field program in diffusion**. Vol. I. Bedford: Geophysical Research Papers n. 59, 1958. Relatório técnico.

BASHEER, I. A.; HAJMEER, M. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application. **Journal of Microbiological Methods**, vol. 43, p. 3-31, 2000.

BRAGA, A.; PEREIRA, L. A. A.; SALDIVA, P. H. N. **Poluição Atmosférica e seus Efeitos na Saúde Humana**, 2001.

CHANG, J. C.; FRANZESE, P.; CHAYANTRAKOM, K.; HANNA, S. R. Evaluations of CALPUFF, HPAC and VLSTRACK with two mesoscale field datasets. **Journal of Applied Meteorology**, vol. 42, p. 453-466, 2003.

CHANG, J. C.; HANNA, S. R. Air quality model performance evaluation. **Meteorology and Atmospheric Physics**, vol. 87, p. 167-196, 2004.

CONTE, G. G. Avaliação do modelo numérico de dispersão de poluentes atmosféricos MODELAR para diferentes condições de estabilidade da Camada Limite Atmosférica. 67 f. Trabalho de Graduação (Bacharelado em Engenharia Ambiental) – Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2013.

DE, S. S.; DEBNATH, A. Artificial neural network based prediction of maximum and minimum temperature in the summer monsoon months over India. **Applied Physics Research**, vol. 1, n. 2, p. 37-44, 2009.

DEGRAZIA, G. A.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J. C.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; CAMPOS VELHO, H. F. Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, vol. 34, n. 21, p. 3575-3583, 2000.

DEGRAZIA, G. A.; RIZZA, U.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T. Validation of a new turbulent parameterization for dispersion models in convective conditions. **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 85, n. 2, p. 243-254, 1997.

DERISIO, J. C. Introdução ao controle de poluição ambiental. 3.ed. São Paulo: Signus Editora, 2007.

DOE (DEPARTMENT OF ENERGY). Hanford overview and history. Disponível em: <http://www.hanford.gov/page.cfm/HanfordOverviewandHistory>. Acesso em: 19/12/2014.

DOCKERY, D. W.; POPE, C. A.; XU, X.; SPENGLER, J. D.; WARE, J. H.; FAY, M. E.; FERRIS, B. G.; SPEIZER, F. E. An association between air pollution and mortality in six U. S. cities. **The New England Journal of Medicine**, v. 329, n. 24, p. 1753-1759, 1993.

DOCKERY, D. W.; POPE III, C. A. Acute respiratory effects of particulate air pollution. **Annual Review of Public Health**, vol. 15, p. 107-132, 1994.

DORAN, J. C.; HORST, T. W. An evaluation of gaussian plume-depletion models with dual-tracer field measurements. **Atmospheric Environment**, vol. 19, n. 6, p. 939-951, 1985.

DROPPO Jr, J. G.; GLANTZ, C. S.; WATSON, C. R.; WOODRUFF, R. K. Preparation, Archiving, and Documentation of Available Meteorological and Tracer Data for Model Evaluation. United States Environmental Protection Agency (EPA), Atmospheric Sciences Research Laboratory, 1985.

ELMINIR, H. K.; AREED, F. F.; ELSAYED, T. S. Estimation of solar radiation components incident on Helwan site using neural networks. **Solar Energy**, vol. 79, p. 270-279, 2005.

EPA (UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY). Integrated Science Assessment for Particulate Matter. National Center for Environmental Assessment - RTP Division. Office of Research and Development. U. S. Environmental Protection Agency 2009.

EPA (UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY). Hanford – Washington. Disponível em: <http://yosemite.epa.gov/r10/cleanup.nsf/sites/Hanford>. Acesso em: 19/12/2014.

FAUSETT, L. **Fundamentals of neural networks. Architectures, algorithms and applications**. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1994.

FOX, D. G. Uncertainty in air quality modeling. **Bulletin American Meteorological Society**, vol. 65, n. 1, p. 27-36, 1984.

FRENCH, M. N., KRAJEWSKI, W. F., CUYKENDALL, R. R. Rainfall forecasting in space and time using a neural network. **Journal of Hydrology**, vol. 137, p. 1-31, 1992.

GARDNER, M. W.; DORLING, S. R. Artificial neural networks (the multilayer perceptron) – A review of applications in the atmospheric sciences. **Atmospheric Environment**, vol. 32, n. 14-15, p. 2627-2636, 1998.

GATES, W. L. Static stability measures in the atmosphere. **Journal of Meteorology**, vol. 18, p. 526-533, 1961.

GENC, S.; ZADEOGLULARI, Z.; FUSS, S. H.; GENC, K. The adverse effects of air pollution on the nervous system. **Journal of Toxicology**, v. 2012, 2012.

GLANTZ, C. S.; WOODRUFF, R. K.; DROPO, J. G. The Hanford 1964 atmospheric dispersion experiment. Micrometeorological and tracer data archive set 002 documentation report. United States Environmental Protection Agency (EPA), Atmospheric Sciences Research Laboratory, 1985.

GRYNING, S. E. **Elevated source SF₆ tracer dispersion experiments in the Copenhagen area**. Roskilde: Riso National Laboratory, 1981. 190 p. Relatório técnico.

GRYNING, S. E.; LYCK, E. Atmospheric Dispersion from Elevated Sources in an Urban Area: Comparison between Tracer Experiments and Model Calculations, vol. 23, p. 651-660, 1984.

GRYNING, S. E.; HOLTSLAG, A. A. M.; IRWIN, J. S.; SIVERTSEN, B.; Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. **Atmospheric Environment**, vol. 21, n. 1, p. 79-89, 1987.

GRYNING, S. E.; LYCK, E. **The Copenhagen Tracer Experiments: Reporting of Measurements**. Roskilde: Riso National Laboratory, 2002. 75 p. Relatório técnico.

HANNA, S. R. Confidence limits for air quality model evaluations, as estimated by Bootstrap and Jackknife resampling methods. **Atmospheric Environment**, vol. 23, n.6, p. 1385-1398, 1989.

HANNA, S. R. Uncertainties in air quality model predictions. **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 62, p. 3-20, 1993.

HAUGSBAKK, I.; TONNESEN, D. A. Atmospheric dispersion experiments at Lillestrom. 1986-1987 Data Report. Lillestrom: Norwegian Institute for Air Research, 1989.

HAYKIN, S. **Neural Networks: A comprehensive foundation**. Upper Saddle River: Prentice-Hall, 1999.

IRWIN, J. S. Atmospheric Transport and Diffusion Data Archive. Disponível em: <<http://www.jsirwin.com/>>. Acesso em: 13/12/2014.

JAIN, A. K.; MAO, J.; MOHIUDDIN, K. M. Artificial Neural Networks: A Tutorial. **IEEE Computer**, p. 31-44, 1996.

KISTLER, R.; KALNAY, E.; COLLINS, W.; SAHA, S.; WHITE, G.; WOOLLEN, J.; CHELLIAH, M.; EBISUZAKI, W.; KANAMITSU, M.; KOUSKY, V.; van den DOOL, H.; JENNE, R.; FIORINO, M. The NCEP-NCAR 50-year Reanalysis: Monthly Means CD-ROM and Documentation. **Bulletin of the American Meteorological Society**, vol. 82, n. 2, p. 247-267, 2001.

LABORATÓRIO DE ESTUDOS EM MONITORAMENTO E MODELAGEM AMBIENTAL (LEMMA). **Relatório de pesquisa nº 39: SISTEMA MODELAR modelo regulatório de qualidade do ar para o Estado do Paraná**. Curitiba: UFPR, 2011. 51p. Relatório técnico.

LI, W. Stable boundary layer height parameterization: Learning from artificial neural networks. **Atmospheric and Climate Sciences**, vol. 3, p. 523-531, 2013.

LOUKACHINE, K.; LOEB, N. G. Application of an artificial neural network simulation for top-of-atmosphere radiative flux estimation from CERES. **American Meteorological Society**, vol. 20, p. 1749-1757, 2003.

MARTINS, F. R.; GUARNIERI, R. A.; PEREIRA, E. B. O aproveitamento da energia eólica. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, vol. 30, n. 1, 1304, 2008.

MARZBAN, C.; STUMPF, G. A neural network for tornado prediction based on Doppler radar-derived attributes. **Journal of Applied Meteorology**, vol. 35, n. 5, p. 617-626, 1996.

NASCIMENTO, E. M.; PEREIRA, B. B.; SEIXAS, J. M. Redes neurais artificiais: uma aplicação no estudo da poluição atmosférica e seus efeitos adversos à saúde. **Revista Brasileira de Biometria**, vol. 27, n. 1, p. 37-50, 2009.

NICKOLA, P. W. **The Handford 67-Series: A Volume of Atmospheric Field Diffusion Measurements**. Richland, BATTELLE Pacific Northwest Laboratories, 1977. 474 p. Relatório técnico.

OLESEN, H. R. Ten years of harmonization activities: past, present and future. In: **7th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes**, p. 1-10, 2001.

OLESEN, H. R. User's guide to the Model Validation Kit. National Environmental Research Institute, Dinamarca, 2005. 74 p.

OZCAN, H. K.; UCAN, O. N.; SAHIN, U.; BORAT, M.; BAYAT, C. Artificial neural network modeling of methane emissions at Istanbul Kemerburgaz-Odayeri landfill site. **Journal of Scientific & Industrial Research**, vol. 65, p. 128-134, 2006.

PELLICCIONI, A.; TIRABASSI, T. Use of neural network to improve the dispersion models performances: proposal of an advanced methodology. **Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks**, vol. 1, p. 267-272, 2001a.

PELLICCIONI, A.; TIRABASSI, T. Application of a neural net filter to improve the performances of an air pollution model. In: **7th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes**, p. 179-182, 2001b.

PELLICCIONI, A.; GARIAZZO, C.; TIRABASSI, T. Coupling of neural network and dispersion models: a novel methodology for air pollution models. **International Journal of Environmental and Pollution**, vol. 20, n. 1-6, p. 136-146. 2003a.

PELLICCIONI, A.; TIRABASSI, T.; GARIAZZO, C. Coupling of neural network and dispersion models: A novel methodology for air pollution models. In: **8th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes**, p. 210-214, 2003b.

PELLICCIONI, A.; GARIAZZO, C.; TIRABASSI, T. Coupling of a lagrangean particle model (SPRAY) and neural network to improve the accuracy on impact assessment of an industrial facility. In: **9th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes**, p. 325-329, 2004.

PELLICCIONI, A. TIRABASSI, T. Air dispersion model and neural network: A new perspective for integrated models in the simulation of complex situations. **Environmental Modelling & Software**, vol. 21, p. 539-546, 2006.

PELLICCIONI, A.; TIRABASSI, T. Air pollution model and neural network: An integrated modelling system. **Il Nuovo Cimento**, vol. 31 C, n. 3, p. 253-273, 2008.

POPE, C. A.; BURNETT, R. T.; THUN, M. J.; CALLE, E. E.; KREWSKI, D.; ITO K.; THURSTON, G. D. Lung cancer, cardiopulmonary mortality and long-term exposure to fine particulate air pollution. **The Journal of the American Medical Association**, v. 287, n. 9, p. 1132-1141, 2002.

RAMSDELL, J. V.; GLANTZ, C. S.; KERNS, R. E. Handford Atmospheric Dispersion Data: 1959-1974. **Atmospheric Environment**, vol. 19, n. 1, p. 83-86, 1985.

RUMELHART, D; HINTON, D.; WILLIAMS, G. Learning internal representations by error propagation. In.____. **Learning internal representations by error propagation**. MIT Press Cambridge, 1986. p. 318-362.

STULL, R. B. **An introduction to boundary layer meteorology**. Kluwer Academic Publishers, 1988.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. Applied dispersion modelling for ground-level concentrations from elevated sources. **Atmospheric Environment**, vol. 28, n. 4, p. 611-615, 1994.

ULKE, A. G. New turbulent parameterization for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, vol. 34, p. 1029-1042, 2000.

VANDERBORGHT, B.; KRETZSCHMAR, J. A literature survey on tracer experiments for atmospheric dispersion modelling studies. **Atmospheric Environment**, vol. 18, n. 11, p. 2395-2403, 1984.

WALLACE, J. M.; HOBBS, P. V. **Atmospheric science an introductory survey**. 2.ed. Academic Press, Elsevier Inc., 2006.

WERBOS, P. Beyond regression: New tools for prediction and analysis in the behavior sciences. Tese (Doutorado em Matemática Aplicada) – Comitê de Matemática Aplicada, Universidade de Harvard, Cambridge, 1974.

WHO (World Health Organization). **Air quality guidelines – Global update**, 2005.

YI, J.; PRYBUTOK, V. R. A neural network model forecasting for prediction of daily maximum ozone concentration in an industrialized urban area. **Environmental Pollution**, vol. 92, n. 3, p. 349-357, 1996.

APÊNDICE A - DIAGRAMAS DE DISPERSÃO PARA OS CASOS ESTÁVEIS
(TESTE 06)

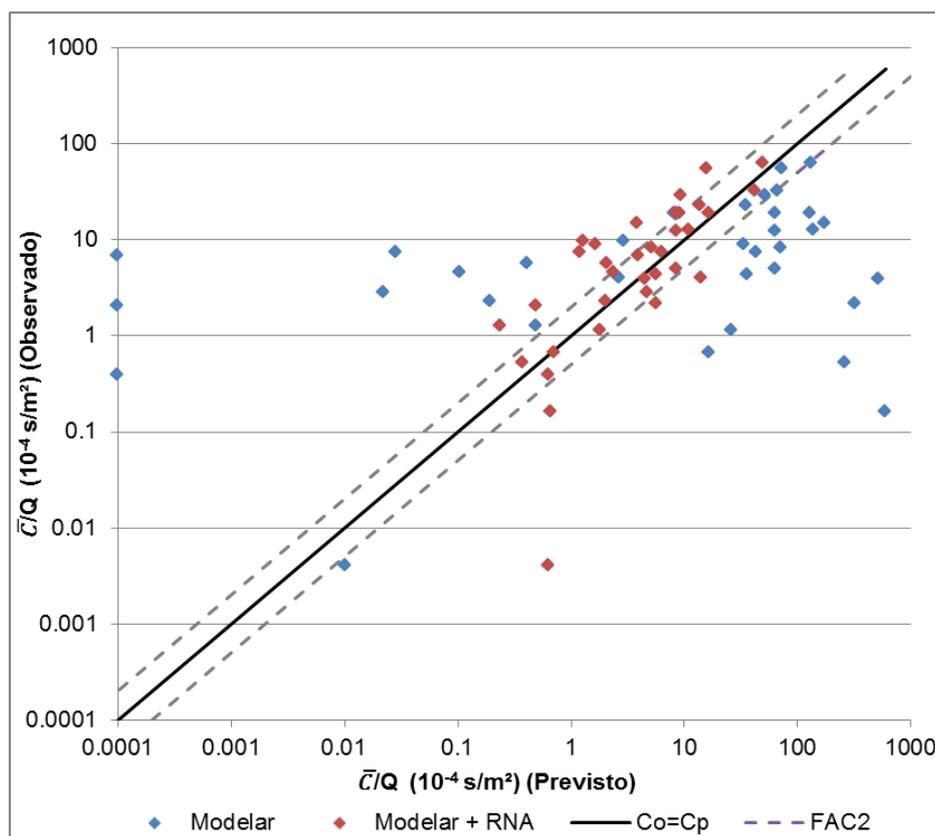


Figura 16 - Diagrama de dispersão para a Simulação 02 do Teste 06 para os casos estáveis

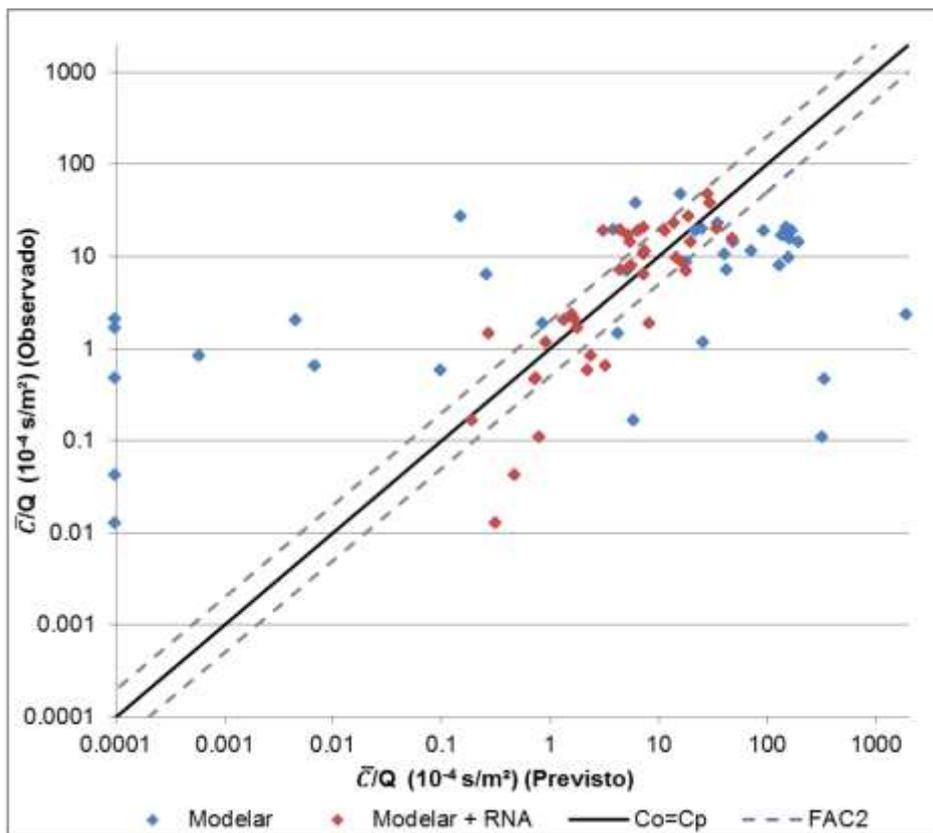


Figura 17 - Diagrama de dispersão para a Simulação 03 do Teste 06 para os casos estáveis

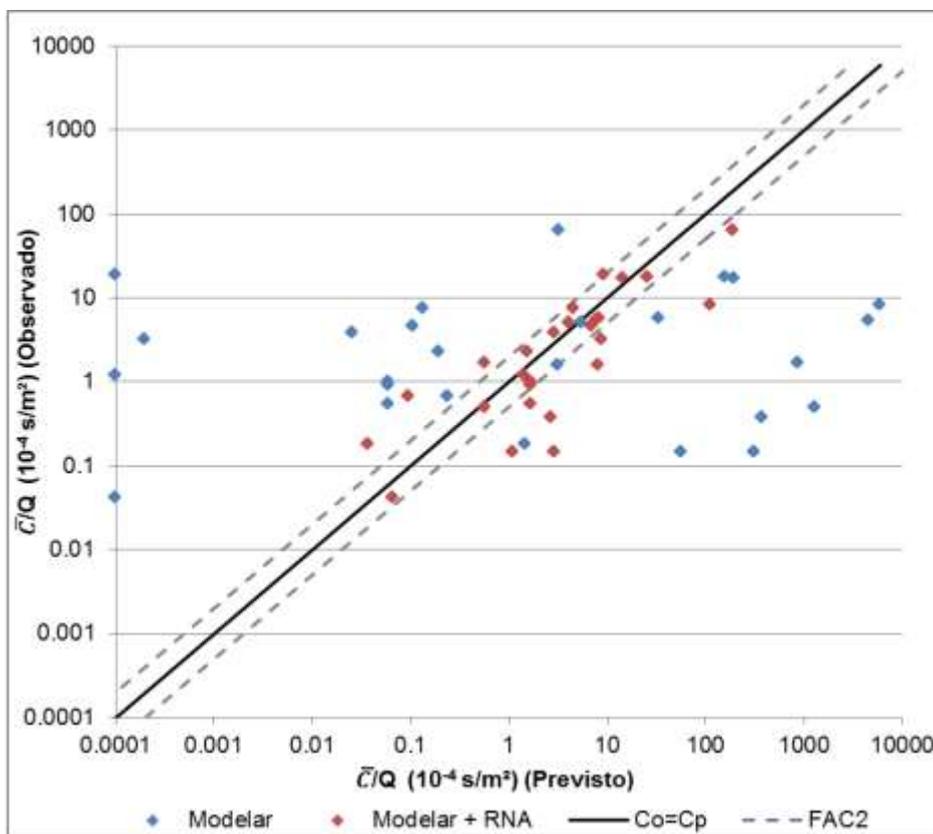


Figura 18 - Diagrama de dispersão para a Simulação 04 do Teste 06 para os casos estáveis

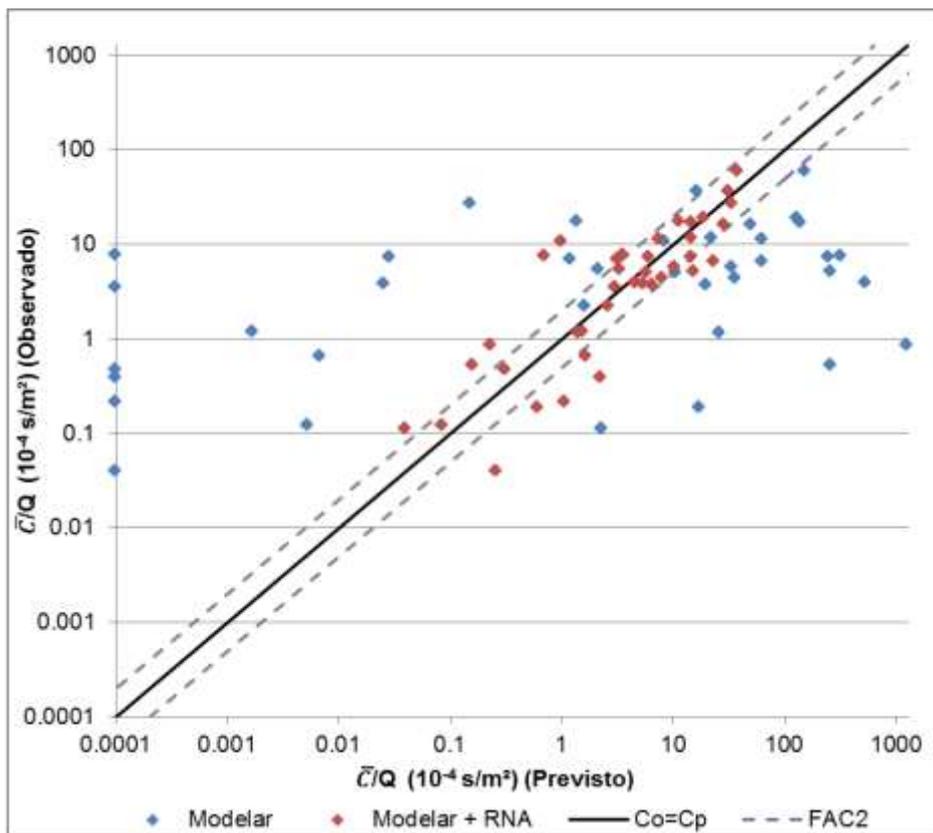


Figura 19 - Diagrama de dispersão para a Simulação 05 do Teste 06 para os casos estáveis

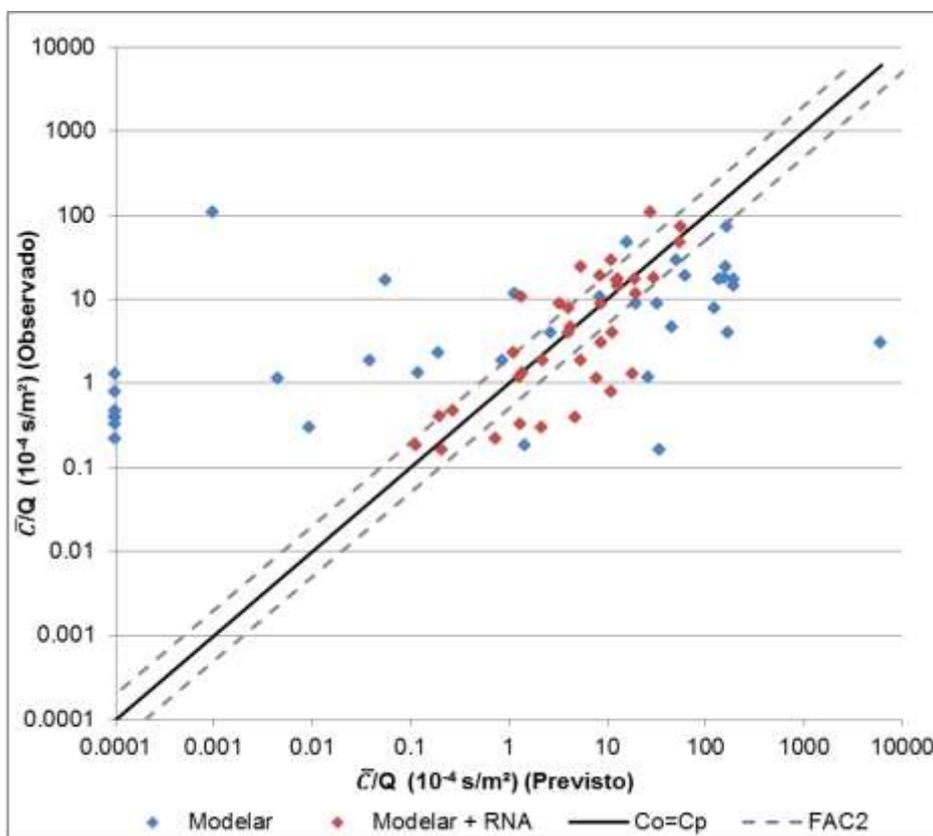


Figura 20 - Diagrama de dispersão para a Simulação 06 do Teste 06 para os casos estáveis

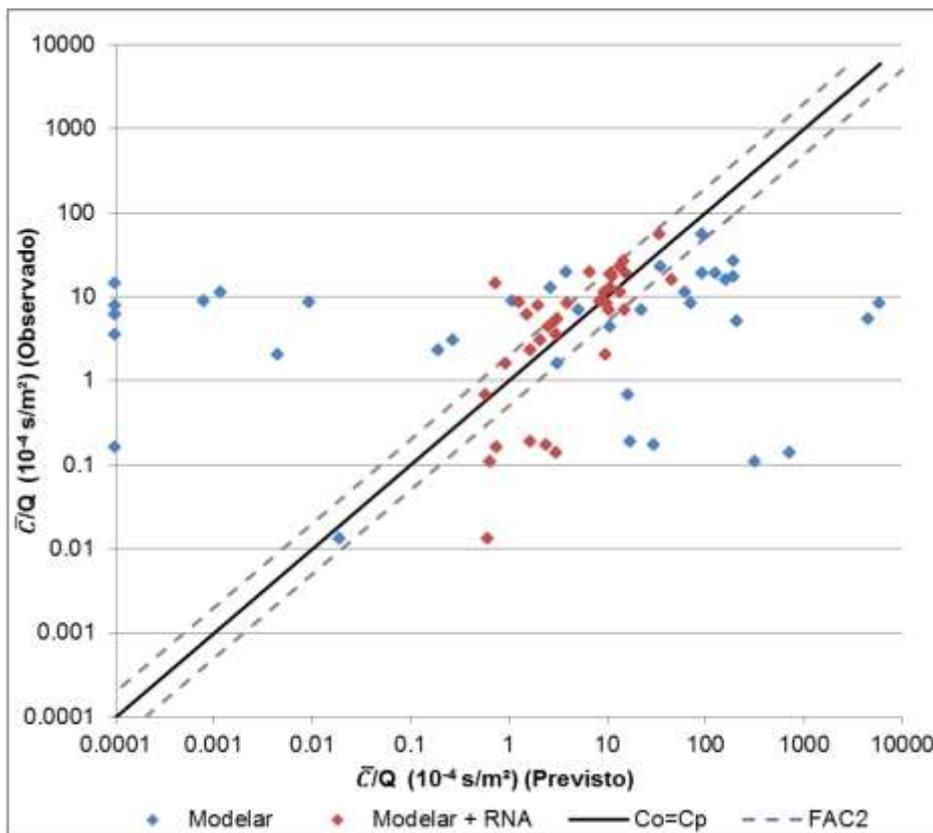


Figura 21 - Diagrama de dispersão para a Simulação 07 do Teste 06 para os casos estáveis

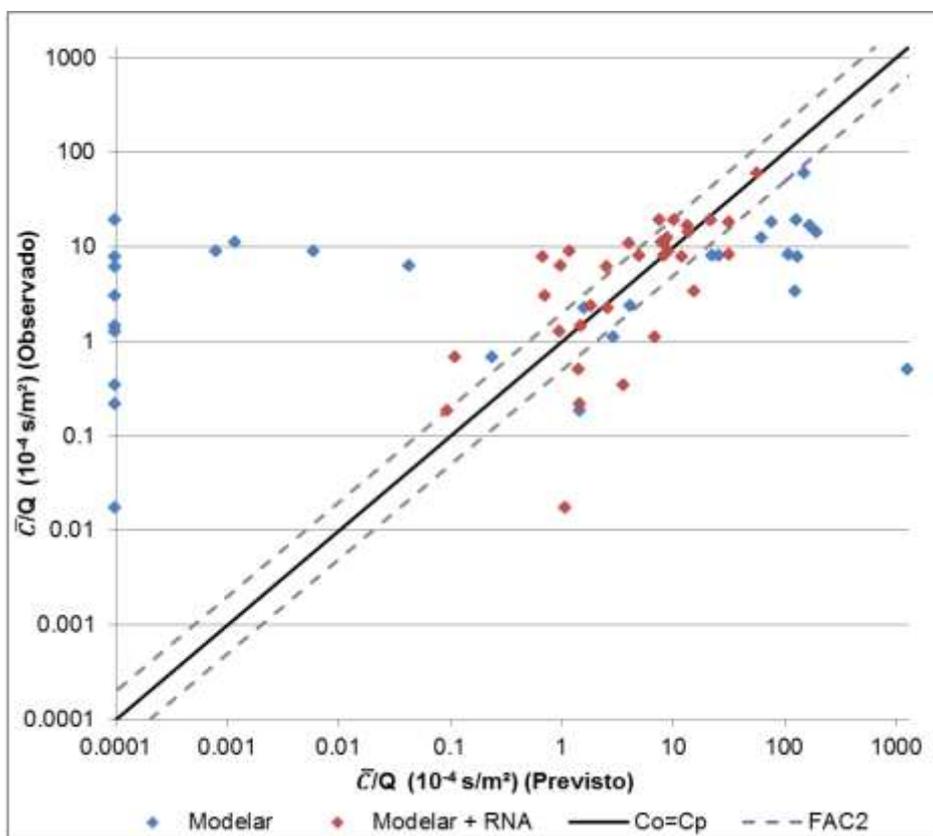


Figura 22 - Diagrama de dispersão para a Simulação 08 do Teste 06 para os casos estáveis

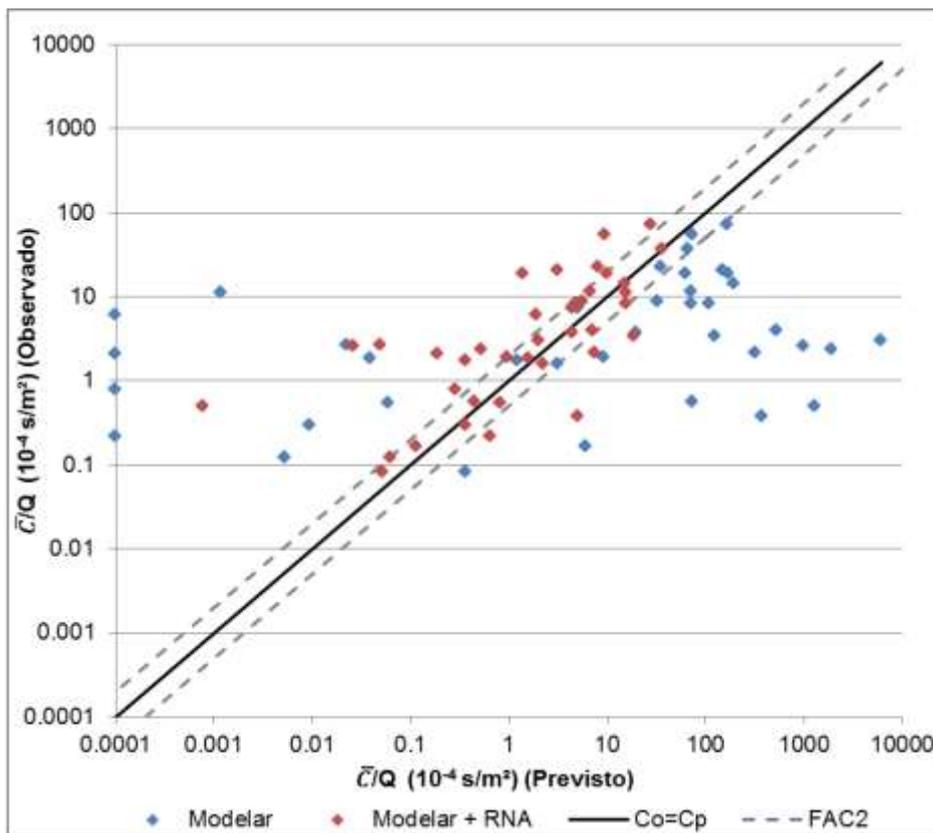


Figura 23 - Diagrama de dispersão para a Simulação 09 do Teste 06 para os casos estáveis

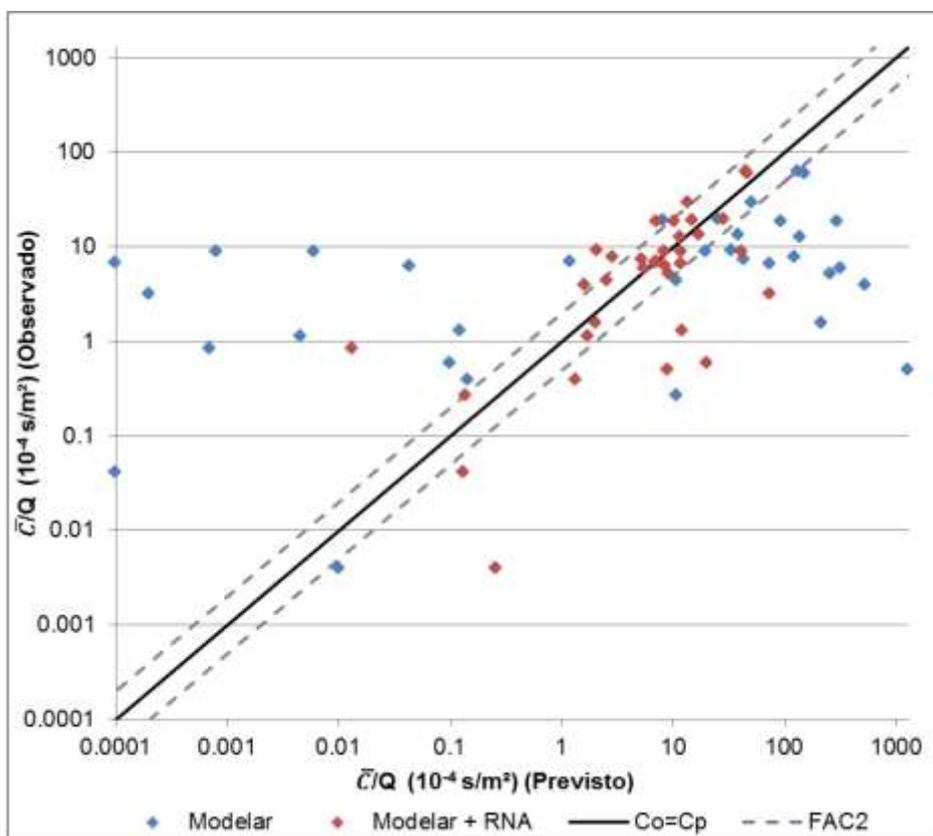


Figura 24 - Diagrama de dispersão para a Simulação 10 do Teste 06 para os casos estáveis

APÊNDICE B – DIAGRAMAS DE DISPERSÃO PARA O CONJUNTO DOS CASOS
NEUTROS E INSTÁVEIS (TESTE 05)

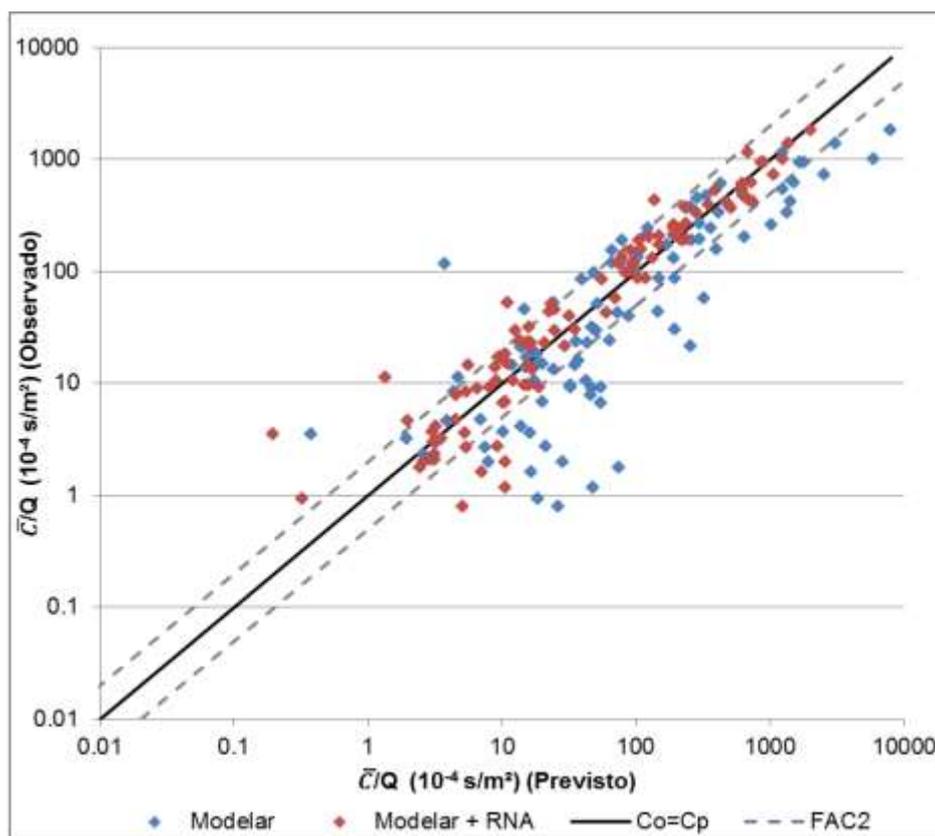


Figura 25 - Diagrama de dispersão para a Simulação 02 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis

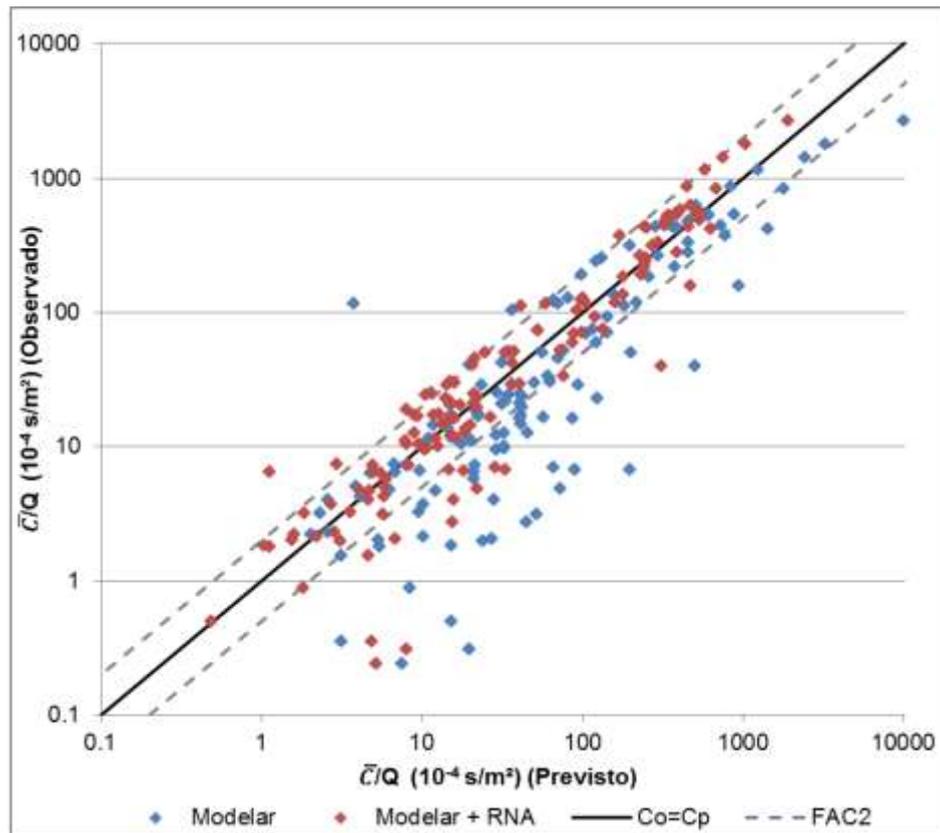


Figura 26 - Diagrama de dispersão para a Simulação 03 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis

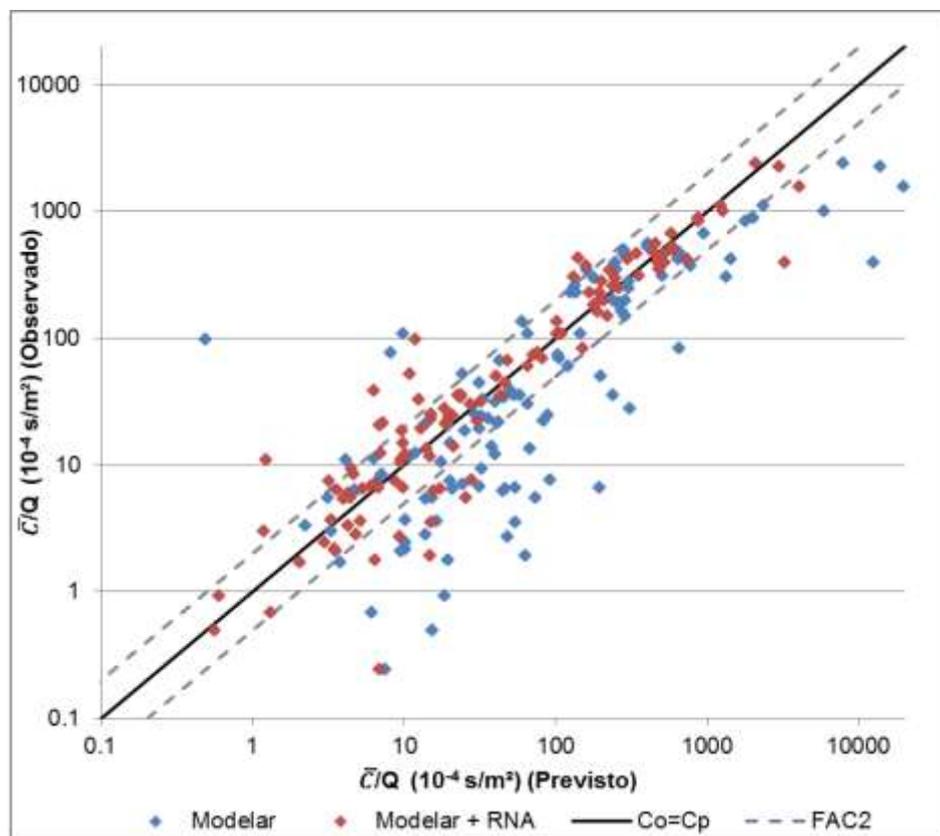


Figura 27 - Diagrama de dispersão para a Simulação 04 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis

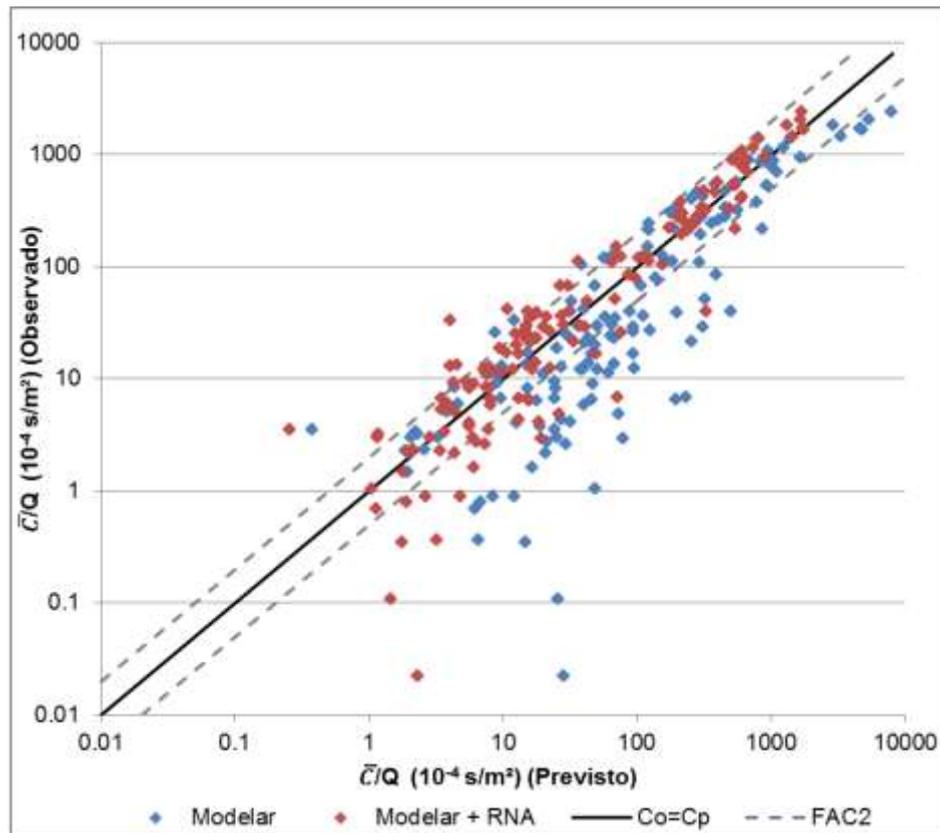


Figura 28 - Diagrama de dispersão para a Simulação 05 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis

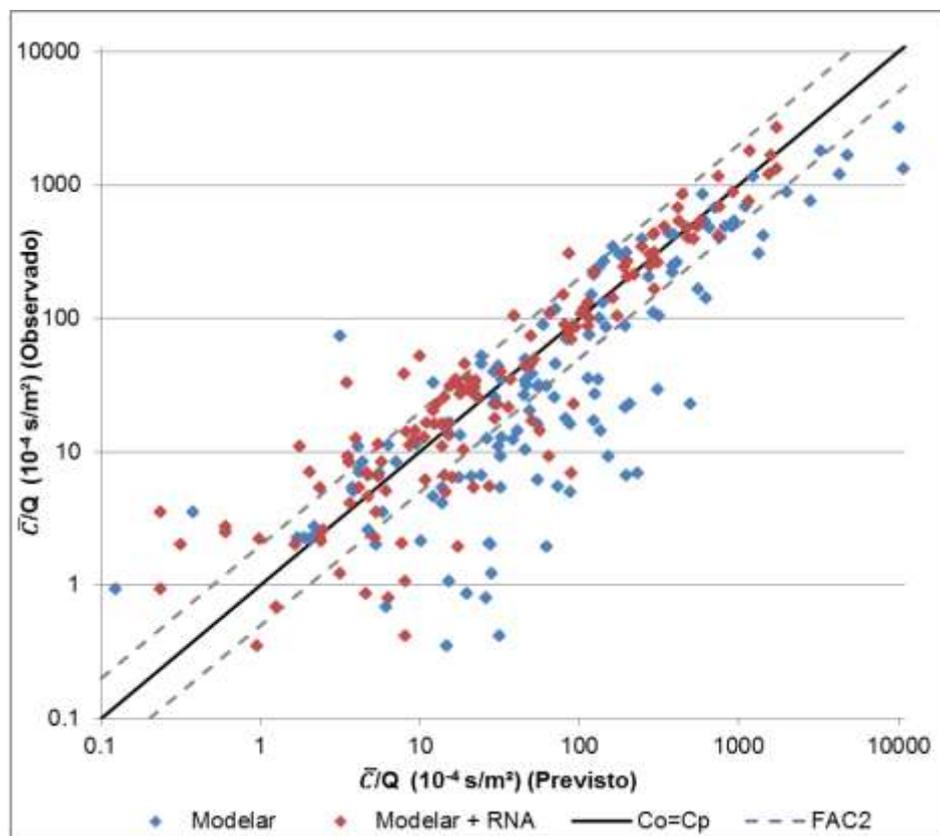


Figura 29 - Diagrama de dispersão para a Simulação 06 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis

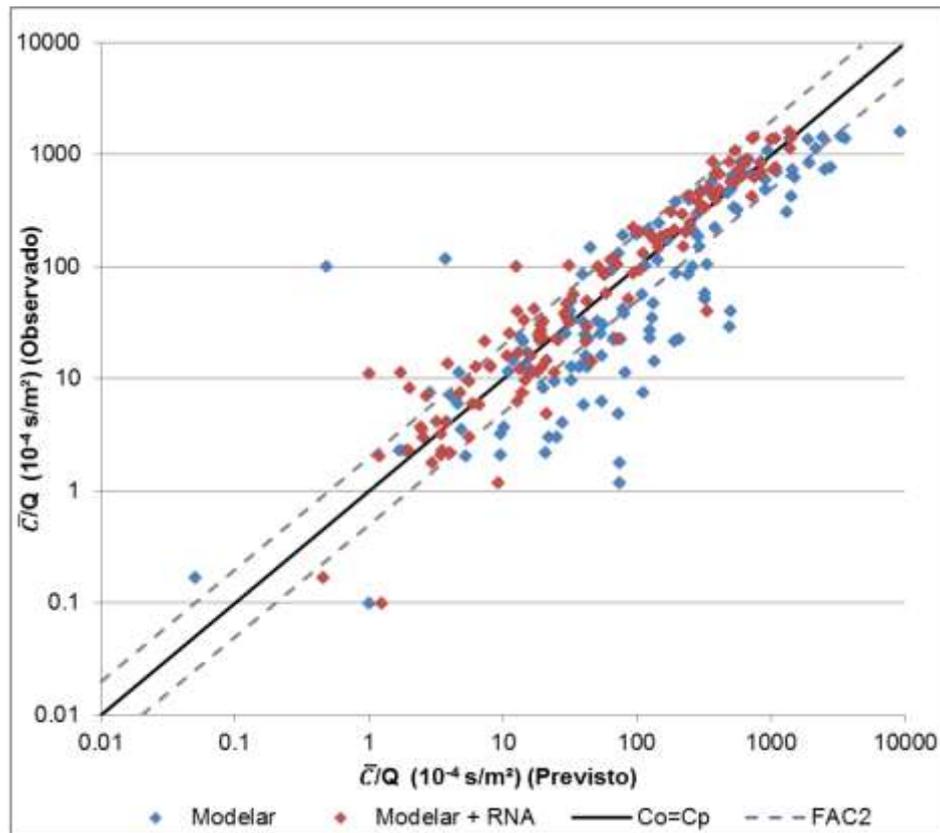


Figura 30 - Diagrama de dispersão para a Simulação 07 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis

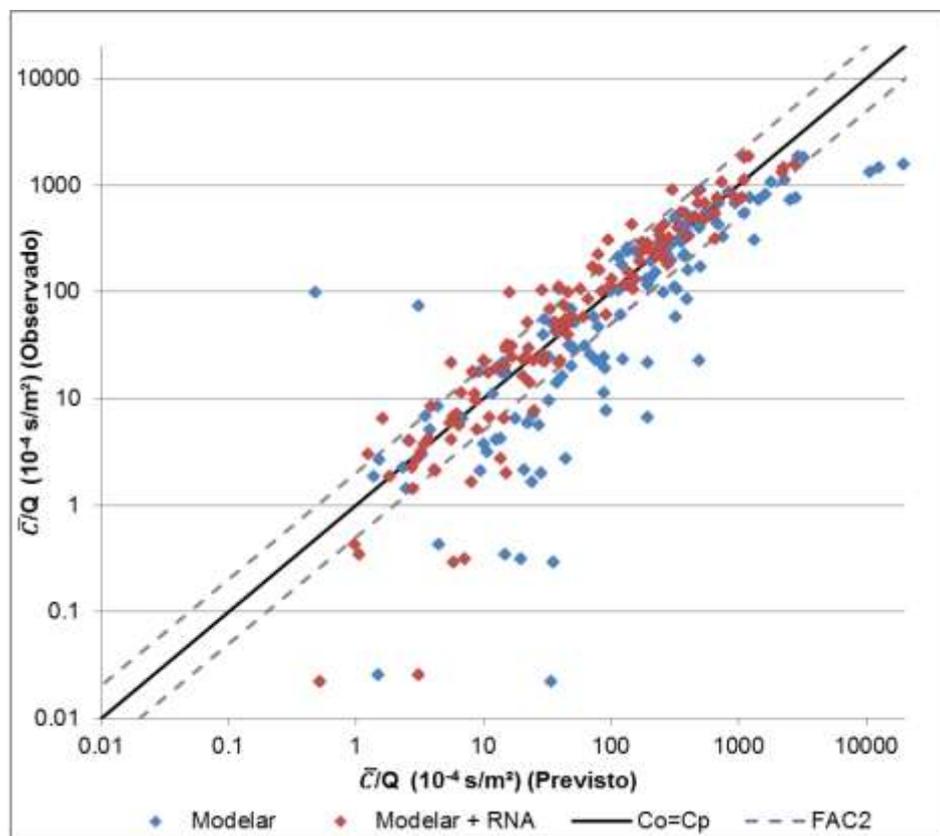


Figura 31 - Diagrama de dispersão para a Simulação 08 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis

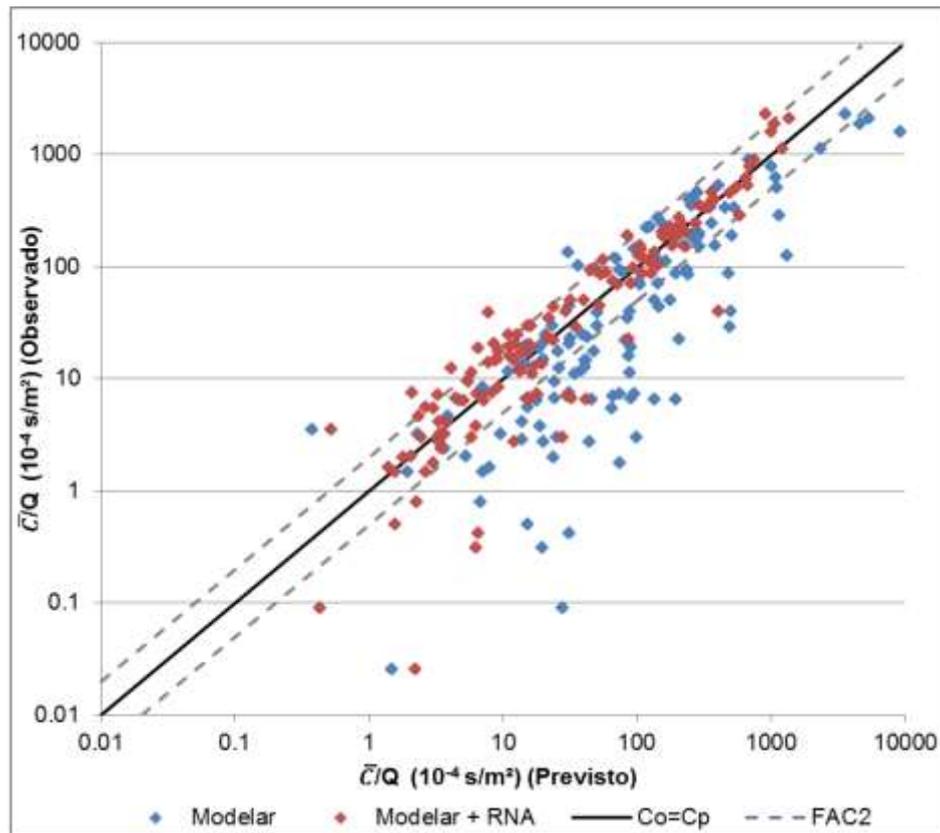


Figura 32 - Diagrama de dispersão para a Simulação 09 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis

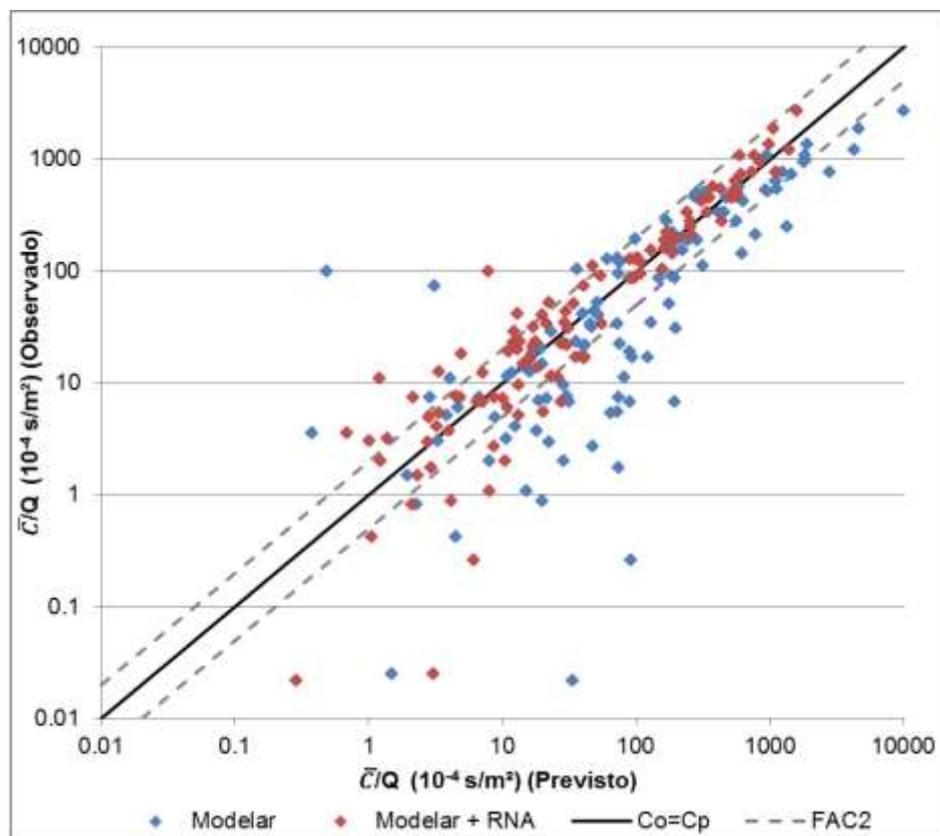


Figura 33 - Diagrama de dispersão para a Simulação 10 do Teste 05 para os casos neutros e instáveis