Universidade de São Paulo
Faculdade de Saúde Pública

Estudo de Modelos de Previsão do Ozônio
Troposférico na Região Metropolitana de São
Paulo

Yoshio Yanagi

Tese apresentada ao Programa de Pós-
Graduação em Saúde Pública para
obtenção do título de Doutor em
Ciências

Área de Concentração: Saúde Ambiental

Orientador: Prof. Dr. João Vicente de
Assunção

São Paulo
2017

Yoshio Yanagi

Estudo de Modelos de Previsão do Ozônio Troposférico na Região Metropolitana de São Paulo

“Versão Corrigida. O original encontra-se disponível na Unidade”.

Tese apresentada ao Programa de Pós-
Graduação em Saúde Pública da
Faculdade de Saúde Pública da
Universidade de São Paulo para
obtenção do título de Doutor em
Ciências

Área de Concentração: Saúde Ambiental

Orientador: Prof. Dr. João Vicente de
Assunção

São Paulo
2017

É expressamente proibida a comercialização deste documento tanto na sua forma impressa como eletrônica. Sua reprodução total ou parcial é permitida exclusivamente para fins acadêmicos e científicos, desde que na reprodução figure a identificação do autor, título, instituição, ano da tese.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais pelo incentivo constante aos meus estudos e por estarem sempre ao meu lado.

Ao meu orientador Professor Dr. João Vicente de Assunção, mais uma vez, pela excelente orientação, disponibilidade, conhecimento, dedicação e incentivo.

À Professora Dra. Helena Ribeiro e à Professora Dra. Maria de Fátima Andrade pelas importantes sugestões na qualificação.

À Professora Dra. Lourdes Conceição Martins pelas importantes sugestões na pré-banca.

Ao Físico Thiago De Russi Colella pelo auxílio na elaboração das planilhas de testes e discussão dos resultados.

Ao Geógrafo e Meteorologista Ricardo Anazia (*in memoriam*) pelas sugestões, informações, amizade, conversas e boas risadas.

À Eng^a Dra. Ligia Cristina Gonçalves de Siqueira pelos conselhos, dicas e conversas durante o curso.

Ao Pedro Daniel Blanco Alves, da Secretaria do Programa de Pós-Graduação do Depto de Saúde Ambiental, sempre colaborando nas diversas dúvidas dos alunos.

Aos funcionários da Biblioteca da Faculdade de Saúde Pública, sempre prestativos e disponíveis em colaborar, desde os tempos do mestrado, nesta excelente FSP-USP.

Ao Professor Dr. Claudio Augusto Oller Nascimento e ao Professor Dr. Roberto Guardani pela permissão do uso do programa de redes neurais.

À CETESB por ter permitido a minha participação no doutorado e a realização deste estudo.

RESUMO

YANAGI, Y. **Estudo de modelos de previsão do ozônio troposférico na Região Metropolitana de São Paulo**. São Paulo, 2017. Tese (Doutorado em Ciências) - Faculdade de Saúde Pública, Universidade de São Paulo.

Introdução. O estudo e compreensão dos efeitos da poluição atmosférica podem contribuir para o planejamento de estratégias de controle de emissões de poluentes e na tomada de decisões em relação à saúde pública. Modelos de previsão da poluição do ar são importantes, na medida em que podem antecipar precauções e providências de ações públicas. **Objetivo.** Elaborar e analisar modelos de previsão do ozônio troposférico para a Região Metropolitana de São Paulo (RMSP). **Métodos.** Foram ajustados modelos de previsão de ozônio utilizando redes neurais artificiais (RNAs), denominadas técnicas de inteligência artificial. Os dados de entrada do modelo foram os meteorológicos, obtidos do CPTEC - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos e do INMET - Instituto Nacional de Meteorologia e os dados do poluente ozônio monitorados pela CETESB – Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. Foram considerados, para o ozônio, o padrão nacional de qualidade do ar (1 hora) e o padrão estadual de qualidade do ar (8 horas). Os dados foram distribuídos entre as médias do período da manhã (07h às 12h) e as médias do período da tarde (13h às 18h), obtendo-se como saída as concentrações máximas de ozônio para o período da tarde. O período analisado foi de 2008 a 2014. **Resultados.** Foram realizados 311 testes distribuídos de acordo com o padrão de qualidade do ar do ozônio (O_3 -1h ou O_3 -8h) e a origem dos dados meteorológicos (CPTEC ou INMET). Os valores de ozônio observados e estimados mostraram-se muito bem correlacionados. Para os ajustes usando o banco de dados do CPTEC, os melhores resultados das estatísticas de verificação para O_3 -1h foram: A=90%; B=0,41; FAR=47%; POD=22%; $r=0,60$. Sendo A a porcentagem de acertos nas previsões de eventos e não eventos; B indica, na média, se as previsões estão subestimadas ou superestimadas; FAR é a porcentagem de concentrações que foram previstas altas e que não ocorreram; POD é a capacidade de prever altas concentrações (%) e r é o coeficiente de correlação entre o valor observado e o valor estimado. Para O_3 -8h: A=96%; B=0,1; FAR=14%; POD=6,5%; $r=0,72$. Considerando-se o banco de dados do INMET, os melhores resultados para O_3 -1h foram: A=93%; B=0,54; FAR=29%; POD=38%, $r=0,84$. Para O_3 -8h: A=95%; B=0,76; FAR=47%; POD=40%; $r=0,85$. As variáveis temperatura e vento meridional foram as mais importantes nos modelos. **Conclusões.** No geral, os modelos simulados com os dados meteorológicos do INMET apresentaram melhores resultados que os apresentados pelos dados do CPTEC, tanto para O_3 -1h, quanto para O_3 -8h. O modelo simulado com os dados do INMET, considerando O_3 -8h, apresentou melhor previsibilidade. Os modelos ajustados por redes neurais mostraram-se como boas alternativas de instrumentos para prever a concentração de ozônio na RMSP.

Palavras-chave: ozônio, modelo, previsão, redes neurais artificiais

ABSTRACT

YANAGI, Y. **Study of tropospheric ozone forecasting models in the São Paulo Metropolitan Area.** São Paulo, 2017. Doctoral Thesis - School of Public Health, University of São Paulo.

Introduction. The study and understanding of the effects of air pollution can contribute to the planning of pollutant emission control strategies and decision-making in relation to public health. Air pollution forecasting models are important, as they can anticipate precautions and actions of public action.

Objective. Develop and analyze tropospheric ozone forecasting models for the São Paulo Metropolitan Area (SPMA). **Methods.** Ozone forecasting models were adjusted using artificial neural networks (ANNs), called artificial intelligence techniques. The model input data were the weather, obtained from CPTEC - Weather and Climate Studies Prediction Center and INMET - National Meteorology Institute and the pollutant ozone data monitored by CETESB - São Paulo State Environmental Company. Were considered for ozone, the national standard of air quality (1 hour) and the state standard of air quality (8 hours). Data were distributed among the averages of the morning (07h to 12h) and the average of the afternoon (13h to 18h), obtaining as output the maximum concentrations of ozone to the afternoon. The study period was from 2008 to 2014. **Results.** Were conducted 311 tests distributed according to the standard of ozone air quality (O₃-1h or O₃-8h) and the source of meteorological data (CPTEC or INMET). The observed and estimated ozone values were shown to be very well correlated. For the settings using the CPTEC database, the best results of the verification statistics for O₃-1h were: A= 90%; B=0.41; FAR=47%; POD=22%; r=0.60. Where A is the percentage of correct answers of forecasts in the events and not events; B indicates, on average, if the predictions are underestimated or overestimated; FAR is the percentage concentrations that were predicted high and that did not occur; POD is the ability to predict high concentrations (%) and r is the correlation coefficient between the observed value and the estimated value. To O₃-8h: A=96%; B=0.1; FAR=14%; POD=6.5%; r=0.72. Considering the INMET database, the best results for O₃-1h were: A=93%; B=0.54; FAR=29%; POD=38%, r=0.84. To O₃-8h: A=95%; B=0.76; FAR=47%; POD=40%; r=0.85. The variables temperature and meridional wind were the most important in the models. **Conclusions.** Overall, the simulated models with meteorological INMET data showed better results than those presented by the CPTEC data for both O₃-1h, and for O₃-8h. The simulated model with INMET data, considering O₃-8h, presented better predictability. The models adjusted by neural networks showed up as good instruments to predict the ozone concentration in the SPMA.

Keywords: ozone, model, forecast, artificial neural networks

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	17
1.1 A POLUIÇÃO DO AR NO CONTEXTO URBANO	19
1.2 OZÔNIO TROPOSFÉRICO	22
1.3 METEOROLOGIA E POLUIÇÃO DO AR	26
1.4 PADRÕES NACIONAIS DE QUALIDADE DO AR	29
1.5 PADRÕES ESTADUAIS DE QUALIDADE DO AR PARA OZÔNIO	31
1.6 OZÔNIO E SAÚDE	34
1.7 OZÔNIO NA REGIÃO METROPOLITANA DE SÃO PAULO	38
1.8 FONTES DE EMISSÃO DE POLUENTES NA RMSP	58
2. OBJETIVO	62
3. MÉTODOS	63
3.1 CARACTERÍSTICAS DOS MODELOS UTILIZADOS	63
3.2 REVISÃO SISTEMATIZADA	65
3.3 DESCRIÇÃO DAS REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	86
4. RESULTADOS	96
4.1 MODELAGEM APLICANDO PADRÃO DO OZÔNIO DE 1 HORA E DADOS DO CPTEC	96
4.2 MODELAGEM APLICANDO PADRÃO DO OZÔNIO DE 8 HORAS E DADOS DO CPTEC	102
4.3 MODELAGEM APLICANDO PADRÃO DO OZÔNIO DE 1 HORA E DADOS DO INMET.....	107
4.4 MODELAGEM APLICANDO PADRÃO DO OZÔNIO DE 8 HORAS E DADOS DO INMET.....	112
5. DISCUSSÃO	117
6. CONCLUSÕES	127
7. BIBLIOGRAFIA	128
APÊNDICE	141
CURRÍCULO LATTES	150

Lista de Figuras

Figura 1	Exemplo da relação entre as concentrações de ozônio em função das concentrações de NO _x e COVs	25
Figura 2	Exemplares de <i>Nicotiana tabacum</i> Bel W3	37
Figura 3	Estação de monitoramento automático Ibirapuera	41
Figura 4	Localização das estações de monitoramento de ozônio na RMSP	42
Figura 5	Evolução do número de dias de ultrapassagem do atual padrão estadual de ozônio, na RMSP	43
Figura 6	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Capão Redondo	47
Figura 7	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Carapicuíba	47
Figura 8	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Cidade Universitária USP-IPEN	48
Figura 9	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Diadema	48
Figura 10	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Guarulhos-Paço Municipal	48
Figura 11	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Ibirapuera	48
Figura 12	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Interlagos	48

Figura 13	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Itaim Paulista	48
Figura 14	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Itaquera	49
Figura 15	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Mauá	49
Figura 16	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Moóca	49
Figura 17	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Nossa Senhora do Ó	49
Figura 18	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Parelheiros	49
Figura 19	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Parque D. Pedro II	49
Figura 20	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Pinheiros	50
Figura 21	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Santana	50
Figura 22	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Santo Amaro	50
Figura 23	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Santo André-Capuava	50

Figura 24	Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação São Caetano do Sul	50
Figura 25	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na RMSP	53
Figura 26	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Capão Redondo	54
Figura 27	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Carapicuíba	54
Figura 28	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Cidade Universitária USP-IPEN	54
Figura 29	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Diadema	54
Figura 30	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Guarulhos-Paço Municipal	54
Figura 31	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Ibirapuera	54
Figura 32	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Interlagos	54
Figura 33	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Itaim Paulista	54
Figura 34	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Itaquera	55
Figura 35	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Mauá	55
Figura 36	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Moóca	55
Figura 37	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Nossa Senhora do Ó	55
Figura 38	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Parelheiros	55

Figura 39	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Parque D. Pedro II	55
Figura 40	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Pinheiros	55
Figura 41	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Santana	55
Figura 42	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Santo Amaro	56
Figura 43	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Santo André-Capuava	56
Figura 44	Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação São Caetano do Sul	56
Figura 45	Estrutura de uma rede neural artificial	88
Figura 46	Ilustração de um neurônio de uma camada j	89
Figura 47	Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 1h e dados do CPTEC)	99
Figura 48	Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 8h e dados do CPTEC)	105
Figura 49	Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 1h e dados do INMET)	110
Figura 50	Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 8h e dados do INMET)	115

Lista de Tabelas

Tabela 1	Exemplo de tabela de contingência	93
Tabela 2	Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 1 hora e dados do CPTEC	97
Tabela 3	Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 1h) e dados do CPTEC	100
Tabela 4	Pesos das variáveis de entrada com dados de ozônio (padrão 1h) e dados do CPTEC	101
Tabela 5	Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 8 horas e dados do CPTEC	102
Tabela 6	Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 8h) e dados do CPTEC	105
Tabela 7	Pesos das variáveis de entrada com dados de ozônio (padrão 8h) e dados do CPTEC	106
Tabela 8	Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 1 hora e dados do INMET	107
Tabela 9	Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 1h) e dados do INMET	110
Tabela 10	Pesos das variáveis de entrada com dados de ozônio (padrão 1h) e dados do INMET	111
Tabela 11	Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 8 horas e dados do INMET	112
Tabela 12	Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 8h) e dados do INMET	115
Tabela 13	Pesos das variáveis de entrada com dados de ozônio (padrão 8h) e dados do INMET	116

Lista de Quadros

Quadro 1	Padrões Nacionais de Qualidade do Ar (CONAMA 003/90)	30
Quadro 2	Padrões Estaduais de Qualidade do Ar (D.E. 59113/2013)	32
Quadro 3	Índices de Qualidade do Ar utilizados pela CETESB	34
Quadro 4	Alguns estudos que relacionam ozônio e outros poluentes atmosféricos e saúde	36
Quadro 5	Distribuição dos artigos da revisão sistematizada, por tipo de modelo de previsão e resultados obtidos	84

Siglas Utilizadas

A	Precisão
ARIMA	<i>Autoregressive Integrated Moving Average</i> (auto-regressivo integrado de média móvel)
B	Desvio
BAM	Memória Associativa Bidirecional
CALGRID	<i>California Photochemical Grid</i>
CAMx	<i>Comprehensive Air Quality Model with Extensions</i>
CBMZ	<i>Carbon Bond Mechanism</i>
CEH	<i>Centre for Ecology and Hydrology</i>
CETESB	Companhia Ambiental do Estado de São Paulo
CIT	<i>California Institute of Technology</i>
CMAQ	<i>Community Multi-scale Air Quality</i>
CPTEC	Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos
CO	Monóxido de Carbono
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
CONSEMA	Conselho Estadual do Meio Ambiente
COV	Composto Orgânico Volátil
COVB	Composto Orgânico Volátil Biogênico
CTM	<i>Chemical Transport Model</i>
EMPLASA	Empresa Paulista de Planejamento Metropolitano
EPA	<i>Environmental Protection Agency</i>
EPUSP	Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
FAPESP	Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo

FAR	Taxa de Alarme Falso
GIS	<i>Geographic Information System</i>
GRE-CAPS	<i>Global-Regional Climate Air Pollution Modeling System</i>
HC	Hidrocarbonetos
HAM	Memória Associativa Holográfica
HMM	<i>Hidden Markov Model</i>
HO ₂ [•]	Radical Hidroperoxila
IAG	Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas
IBAMA	Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
IBOPE	Instituto Brasileiro de Opinião Pública e Estatística
INMET	Instituto Nacional de Meteorologia
INPE	Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
IPCC	<i>Intergovernmental Panel on Climate Change</i>
LAPAT	Laboratório de Análise dos Processos Atmosféricos
LSCP	Laboratório de Simulação e Controle de Processos
MMA	Ministério do Meio Ambiente
MP	Material Particulado
MP _{2,5}	Partículas Inaláveis Finas cujo diâmetro aerodinâmico equivalente é menor que 2,5 µm
MP ₁₀	Partículas Inaláveis cujo diâmetro aerodinâmico equivalente é menor que 10 µm
NAQFC	<i>National Air Quality Forecast Capability</i>
NEAQS	<i>New England Air Quality Study</i>

NMHC	Hidrocarbonetos exceto metano
NO	Óxido Nítrico ou Monóxido de Nitrogênio
NO ₂	Dióxido de Nitrogênio
NO _x	Óxidos de Nitrogênio
NOAA	<i>National Oceanic and Atmospheric Administration</i>
O ₂	Oxigênio
O ₃	Ozônio
OH [•]	Radical Hidroxila
OMS	Organização Mundial da Saúde
POD	Probabilidade de Detecção
r	Coeficiente de Correlação
R [•]	Radical Alquila
RACM	<i>Regional Atmospheric Chemical Model</i>
RCOH	Aldeídos
RH	Hidrocarbonetos
RMSP	Região Metropolitana de São Paulo
RNAs	Redes Neurais Artificiais
RO [•]	Radical Alcoxi
RO ₂ [•]	Radical Peróxi
SAPRC	<i>Statewide Air Pollution Research Center</i>
SMOKE	<i>Sparce Matrix Operator Kernel Emissions</i>
SO _x	Óxidos de Enxofre
SO ₂	Dióxido de Enxofre

UAM	<i>Urban Airshed Model</i>
USEPA	<i>United States Environmental Protection Agency</i>
WHO	<i>World Health Organization</i>
WRF/Chem	<i>Weather Research and Forecasting - Chemistry</i>

1. INTRODUÇÃO

As preocupações com os problemas ambientais estão inseridas na saúde pública desde os seus primórdios, cuja área específica para tratar dessas questões foi estruturada somente na segunda metade do século XX. Essa área que trata da inter-relação entre saúde e meio ambiente foi denominada de saúde ambiental (RIBEIRO, 2004).

A poluição atmosférica constitui-se em problema de saúde pública e ambiental e um grande desafio à gestão. O estudo e compreensão dos seus efeitos podem contribuir para o planejamento estratégico e formulação de políticas públicas visando proteger a população. O conhecimento científico é de grande utilidade no auxílio às decisões relativas à saúde coletiva, subsidiando a elaboração de medidas voltadas à prevenção e redução da poluição do ar (NASCIMENTO et al., 2009).

O ar limpo é considerado um requisito básico para o bem-estar e a saúde humana. Entretanto, a poluição do ar continua sendo uma ameaça significativa para a saúde em nível mundial (WHO, 2013).

Nas estimativas de 2012, relatadas pela WHO - World Health Organization, cerca de 7 milhões de pessoas morreram - uma em cada oito do total de mortes globais - como resultado da exposição à poluição do ar. Estas estimativas indicam que a poluição do ar se tornou um grande risco para a saúde no mundo e reduzi-la poderia salvar milhões de vidas (WHO, 2014).

A Região Metropolitana de São Paulo (RMSP) apresenta atualmente

condições de qualidade do ar degradada e possui diversas características que favorecem o desenvolvimento de estudo dos danos e prejuízos causados pela poluição atmosférica, tais como região altamente populosa, condições meteorológicas adversas à dispersão de poluentes, numerosa frota de veículos automotores e grande número de fontes fixas poluidoras.

O excesso de ozônio na atmosfera pode provocar diversos efeitos sobre a saúde humana, causando problemas respiratórios e pulmonares, agravamento da asma e redução da função pulmonar. Na Europa é, atualmente, um dos poluentes atmosféricos que mais preocupam as autoridades (WHO, 2015).

Portanto, o estudo do ozônio é muito importante para se obter informações necessárias para subsidiar ações e medidas de controle do poluente, almejando melhorar a qualidade de vida.

1.1 A POLUIÇÃO DO AR NO CONTEXTO URBANO

A poluição urbana, em sua forma de constituir qualquer alteração introduzida no ecossistema, resultado da ação humana, pode ser de diferentes formas. No senso comum, a mais característica é a poluição do ar (RIBEIRO, 2006).

Segundo a Resolução CONAMA 003/1990 (BRASIL, 1990), poluente atmosférico é qualquer forma de matéria ou energia com intensidade em quantidade, concentração ou características em desacordo com os níveis estabelecidos e que tornem ou possam tornar o ar:

- impróprio, nocivo ou ofensivo à saúde;
- inconveniente ao bem-estar público;
- danoso aos materiais, à fauna e flora;
- prejudicial à segurança, ao uso e gozo da propriedade e às atividades normais da comunidade.

Pesquisas apontam que a poluição do ar pode afetar os ecossistemas. Os poluentes atmosféricos, como os compostos de enxofre, podem elevar a quantidade de ácido nos lagos e córregos e podem danificar florestas e solos, por meio de chuva ácida. Os compostos de nitrogênio na atmosfera podem ocasionar efeitos deletérios para a fauna e flora aquática quando depositados em águas superficiais. O ozônio pode danificar as folhas de árvores e afeta negativamente o cenário em áreas naturais protegidas (USEPA, 2015).

A poluição atmosférica acarreta, também, maiores gastos do Estado,

decorrentes do aumento do número de atendimentos e internações hospitalares, além do uso de medicamentos, custos esses que poderiam ser evitados com a melhoria da qualidade do ar dos centros urbanos (MMA, 2015).

Uma pesquisa realizada pelo IBOPE – Instituto Brasileiro de Opinião Pública e Estatística, sobre o tema mobilidade urbana, em que foram entrevistadas 700 pessoas na cidade de São Paulo, entre 28 de agosto e 05 de setembro de 2015, mostrou diversos aspectos ligados à qualidade de vida.

Quando a pergunta foi relacionada às questões problemáticas da cidade de São Paulo, a poluição foi a oitava mais citada entre as dezoito respostas dadas pelos entrevistados. As dez mais citadas foram: saúde (55%), segurança pública (37%), educação (33%), desemprego (33%), trânsito (29%), transporte coletivo (27%), abastecimento de água (21%), poluição (17%), habitação (10%) e rede de esgoto (7%). O meio ambiente foi mencionado na décima quinta colocação (3%).

Quando questionados sobre que tipo de poluição é mais grave na cidade de São Paulo, 59% dos entrevistados responderam como sendo a poluição do ar, 30% a poluição da água, 9% a poluição sonora e 2% a poluição visual. Sobre a ocorrência de problemas de saúde no domicílio, relacionados à poluição do ar da cidade, 62% responderam sim e 38% responderam não.

O tempo médio diário de deslocamento na cidade para realizar a atividade principal (trabalho, estudo, etc.), considerando ida e volta, foi de 1

hora e 44 minutos (para aqueles que utilizam automóvel todos os dias/quase todos os dias). A média para quem usa o transporte público coletivo todos os dias/quase todos os dias foi de 1 hora e 58 minutos (IBOPE, 2015).

Dessa forma, conclui-se que a população está mais consciente de que questões ambientais como a poluição do ar, entre outras, estão cada vez mais presentes no dia-a-dia de cada cidadão, principalmente das grandes cidades. E que, conseqüentemente, estão relacionadas à ocorrência de problemas de saúde.

A boa gestão da qualidade do ar deve ter como objetivo contribuir para um desenvolvimento socioeconômico sustentável e ambientalmente seguro. Para tanto, se fazem necessárias ações de prevenção, combate e redução das emissões de poluentes atmosféricos (MMA, 2015). Como parte, dessas ações, uma importante ferramenta são os modelos de previsão de concentrações de poluentes atmosféricos, e entre eles os modelos de previsão de concentrações de ozônio estão entre os mais importantes pela ocorrência frequente de níveis altos em várias regiões do Estado de São Paulo, do Brasil e, também, mundialmente.

1.2 OZÔNIO TROPOSFÉRICO

A atmosfera terrestre possui uma estrutura vertical variável quanto a diversos aspectos: composição, temperatura, umidade, pressão, movimentos, entre outros. Costuma-se dividir a atmosfera em várias camadas, com características próprias, embora não seja homogênea. No entanto, as camadas interagem entre si, pois não existem limites físicos que as separem (VIANELLO, 2012).

Na troposfera, camada da atmosfera que se estende da superfície até aproximadamente 11 km de altitude, ocorre a maioria dos fenômenos meteorológicos. Esta camada, que contém o ar que respiramos e onde se forma a chuva, é onde, na média, a temperatura do ar decresce com a altitude, ressalvada a ocorrência de inversões térmicas. Nos níveis mais baixos da troposfera, justamente onde respiramos, ocorrem os fenômenos de poluição atmosférica, sobretudo a poluição antropogênica. Uma exceção de poluição atmosférica que não ocorre em baixas altitudes é o efeito de certos poluentes na camada de ozônio na estratosfera, camada acima da troposfera, que protege a biosfera da ação direta da radiação solar ultravioleta (ÁLVARES JR et al., 2002).

O ozônio troposférico não é emitido diretamente para a atmosfera, mas é formado por meio de reações químicas entre óxidos de nitrogênio (NO_x) e compostos orgânicos voláteis (COVs), na presença de radiação solar. As emissões de instalações industriais e termelétricas, veículos automotores, os vapores da gasolina e solventes químicos são algumas das

principais fontes de NO_x e COVs (USEPA, 2014).

Os hidrocarbonetos gasosos também estão presentes no ar urbano, resultante da evaporação de solventes, combustíveis líquidos e outros compostos orgânicos. Os COVs são substâncias, incluindo hidrocarbonetos e seus derivados, que se vaporizam facilmente (BAIRD, 2002).

O ozônio é mais facilmente formado em dias quentes e ensolarados, quando o ar está estagnado. Por outro lado, a sua formação é mais limitada quando o dia está nublado, frio, chuvoso e com ventos (USEPA, 2014).

O ozônio é formado pela reação (1) entre o oxigênio atômico (O) e molecular (O_2):

Onde M é um componente que participa da reação, mas não tem sua estrutura alterada, podendo ser o nitrogênio molecular (N_2), por exemplo, contribuindo para tornar o ozônio mais estável.

Em atmosferas urbanas, a principal fonte do oxigênio atômico é a fotólise do dióxido de nitrogênio (NO_2) pela radiação solar.

O O_2 e o NO_2 , na presença de radiação solar ($h\nu$), podem reagir na atmosfera e formar O_3 e óxido nítrico (NO), conforme reações (2), (3) e (4):

Segundo SEINFELD (1986), uma das formas para entender a química orgânica atmosférica é pelas reações com o radical hidroxila ($\text{OH}^\bullet$), um dos

principais oxidantes da atmosfera.

A conversão de NO em NO₂, pelas reações entre o radical OH[•] e os hidrocarbonetos (RH), dentre eles os COVs, com formação inicial de radicais alquila (R[•]) e peroxi (RO₂[•]) pode ser demonstrada da seguinte forma, conforme (5) e (6):

Os radicais peróxi reagem rapidamente com NO para formar NO₂ e outros radicais livres, como o hidropoxi (HO₂[•]) e também aldeídos (R'CHO) (SEINFELD, 1986), conforme (7) e (8):

Finalmente, os radicais hidropéroxí podem reagir com NO para regenerar OH[•] e completar o ciclo (SEINFELD, 1986), conforme (9):

A dinâmica da relação entre os óxidos de nitrogênio (NO_x) e os COVs na formação de ozônio é complexa devido às diferentes reatividades de diferentes espécies que compõem os COVs, e aos muitos fatores intervenientes nas reações entre estes dois grupos de substâncias químicas. Isto pode ser ilustrado, através de isopletras da Figura 1, onde as concentrações de ozônio são apresentadas de acordo com as concentrações de NO_x e COVs.

Figura 1- Exemplo da relação entre as concentrações de ozônio em função das concentrações de NO_x e COVs

Fonte: SEINFELD e PANDIS, 1998

Um modelo que engloba reações térmicas e fotoquímicas denominado *Statewide Air Pollution Research Center* (SAPRC) foi desenvolvido por William Carter, em 1990, na Universidade da Califórnia, Riverside. Para quantificar os impactos na formação de ozônio por um dado valor de COV foi criado o termo “reatividade incremental”, definido como a alteração na concentração do ozônio causada pela adição de uma quantidade pequena de um dado valor de COV, dividida pela quantidade de COV adicionada (ORLANDO, 2008).

Foi observado, também, que a meteorologia tem papel importante na formação do ozônio troposférico.

1.3 METEOROLOGIA E POLUIÇÃO DO AR

As concentrações dos poluentes atmosféricos são resultantes de interações entre os padrões climáticos locais, características de circulação atmosférica, vento, topografia e outros fatores. Alguns locais estão predispostos à má qualidade do ar, porque o clima é propício para reações químicas levando à transformação de emissões e a topografia restringe a dispersão de poluentes (EBI et al., 2008).

Algumas substâncias e compostos podem permanecer na atmosfera por longos períodos de tempo e alcançar grandes distâncias, devido às características da circulação ou das chuvas. Essas características elevam alguns tipos de poluição a um potencial de alta abrangência, responsável por alterações de grande escala, o que obriga esforços em âmbito local, nacional e global (MMA, 2015).

A poluição atmosférica afeta todos os elementos do clima: nebulosidade, radiação, visibilidade, temperatura, umidade, precipitação e neblina (RIBEIRO, 2006).

Os eventos meteorológicos têm papel fundamental em relação à qualidade do ar, pois influenciam na dispersão e no transporte dos poluentes, além da deposição no solo (MOREIRA et al., 2008).

As brisas marítima e terrestre, por exemplo, são fenômenos meteorológicos muito importantes para a dispersão dos poluentes, principalmente nas regiões mais próximas do litoral. Dependendo das condições meteorológicas, a brisa pode ser inibida ou intensificada

(ÁLVARES JR et al., 2002).

A poluição atmosférica não atinge somente aqueles que se encontram nas imediações das fontes poluidoras, pois a ação dos ventos tem grande importância no transporte do poluente para outras regiões, podendo atingir grandes distâncias (VIANELLO, 2012).

O ozônio pode atingir níveis insalubres em dias de sol intenso em ambientes urbanos e, também, ser transportado a longas distâncias pelo vento. Por esta razão, mesmo as áreas rurais podem experimentar altos níveis do poluente (USEPA, 2014).

De acordo com ÁLVARES JR et al. (2002), para melhor compreensão dos fenômenos meteorológicos e seus efeitos na dispersão dos poluentes, estes são classificados em escalas espacial e temporal de abrangência. No caso de escala espacial, temos:

Grande escala: ocorrem na escala de milhares de quilômetros, tais como anticiclones subtropicais, frentes frias, etc. Também são denominados fenômenos de escala sinótica;

Mesoescala: ocorrem na escala de centenas de quilômetros, tais como a circulação de brisas marítima e terrestre, ventos de vale-montanha, etc. Também são denominados fenômenos de escala regional;

Microescala: ocorrem na escala de poucos quilômetros, tais como a dispersão de uma pluma (fumaça) de uma chaminé, efeito de um edifício no fluxo de vento, entre outros.

Diversos estudos relacionaram a ocorrência de ozônio às condições meteorológicas do local.

Em CAMALIER et al. (2007) está descrita uma metodologia estatística ajustando as tendências das concentrações de ozônio, bem como caracterizando as relações entre os parâmetros meteorológicos individuais e este poluente. Um modelo linear generalizado foi aplicado às variáveis meteorológicas (temperatura, vento, umidade relativa, pressão, estabilidade) em 39 áreas urbanas do leste dos Estados Unidos. No geral, o modelo funcionou muito bem resultando em coeficientes de determinação (R^2) em torno de 0,80. A análise confirmou que o ozônio geralmente tem o valor elevado com o aumento da temperatura, diminuindo com o aumento da umidade relativa.

Simulações fotoquímicas, com o modelo Euleriano 3-D CIT, realizadas por BOIAN e ANDRADE (2012) mostraram que as concentrações de ozônio na Região Metropolitana de Campinas (RMC) estavam associadas às emissões locais e ao transporte de ozônio e precursores da RMSP, corroborando a importância das condições meteorológicas e topográficas no transporte de poluentes das fontes locais para outras regiões.

Avanços na modelagem estatística da relação entre a qualidade do ar e meteorologia devem ajudar a corroborar os resultados que estão sendo obtidos a partir de simulações numéricas que preveem a resposta da qualidade do ar às mudanças nas condições climáticas.

1.4 PADRÕES NACIONAIS DE QUALIDADE DO AR

Os padrões de qualidade do ar (PQAr), segundo publicação da Organização Mundial da Saúde (OMS) em 2005, variam de acordo com a abordagem adotada para balancear riscos à saúde, viabilidade técnica, considerações econômicas e vários outros fatores políticos e sociais, que por sua vez dependem, entre outras coisas, do nível de desenvolvimento e da capacidade nacional de gerenciar a qualidade do ar. As diretrizes da OMS levam em conta esta heterogeneidade e reconhecem que, ao formularem políticas de qualidade do ar, os governos devem considerar cuidadosamente suas circunstâncias locais antes de adotarem os valores propostos como padrões nacionais (CETESB, 2014).

O IBAMA – Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis estabeleceu os padrões nacionais de qualidade do ar e os respectivos métodos de referência, através da Portaria Normativa nº 348 de 14/03/90 (IBAMA, 1990). Os valores dos padrões estabelecidos através dessa portaria foram submetidos ao CONAMA em 1990 e transformados na Resolução CONAMA nº 03/90.

Os padrões nacionais de qualidade do ar da resolução CONAMA 03/1990, mostrados no Quadro 1, foram divididos em primários e secundários, para os quais foram adotadas as seguintes definições: São padrões primários de qualidade do ar as concentrações de poluentes que, quando ultrapassadas, poderão afetar a saúde da população. São padrões secundários de qualidade do ar as concentrações de poluentes atmosféricos

abaixo das quais se prevê o mínimo efeito adverso sobre o bem estar da população e o mínimo dano à fauna e à flora, aos materiais e ao meio ambiente em geral. Podem ser entendidos como níveis desejados de concentração de poluentes, constituindo-se em meta de longo prazo.

Quadro 1 - Padrões Nacionais de Qualidade do Ar (CONAMA 003/90)

Poluente	Tempo de Amostragem	Padrão Primário $\mu\text{g}/\text{m}^3$	Padrão Secundário $\mu\text{g}/\text{m}^3$
partículas totais em suspensão	24 horas ¹ MGA ²	240 80	150 60
partículas inaláveis	24 horas ¹ MAA ³	150 50	150 50
fumaça	24 horas ¹ MAA ³	150 60	100 40
dióxido de enxofre	24 horas ¹ MAA ³	365 80	100 40
dióxido de nitrogênio	1 hora MAA ³	320 100	190 100
monóxido de carbono	1 hora ¹ 8 horas ¹	40.000 35 ppm 10.000 9 ppm	40.000 35 ppm 10.000 9 ppm
ozônio	1 hora ¹	160	160

Fonte: CETESB, 2013

Notas:

¹ - Não deve ser excedido mais que uma vez ao ano.

² - Média geométrica anual.

³ - Média aritmética anual

1.5 PADRÕES ESTADUAIS DE QUALIDADE DO AR PARA OZÔNIO

Em 2013, o Estado de São Paulo estabeleceu novos valores para os Padrões de Qualidade do Ar pelo Decreto Estadual nº 59.113 de 23/04/2013 (SÃO PAULO, 2013), tendo como base diretrizes da OMS. Assim, este estudo será efetuado considerando-se estes novos padrões estaduais de qualidade do ar.

O Decreto Estadual estabelece que a administração da qualidade do ar no território do Estado de São Paulo será efetuada através de Padrões de Qualidade do Ar, considerando um conjunto de metas gradativas, para que a poluição atmosférica seja reduzida a níveis desejáveis ao longo do tempo, observados os seguintes critérios:

I. Metas Intermediárias (MI) - estabelecidas como valores temporários a serem cumpridos em etapas, visando à melhoria gradativa da qualidade do ar no Estado de São Paulo, baseada na busca pela redução das emissões de fontes fixas e móveis, em linha com os princípios do desenvolvimento sustentável.

II. Padrões Finais (PF) - Padrões determinados pelo melhor conhecimento científico para que a saúde da população seja preservada ao máximo em relação aos danos causados pela poluição atmosférica.

O Quadro 2 apresenta os padrões de qualidade do ar estabelecidos no Decreto Estadual nº 59.113/2013, sendo que os padrões vigentes estão descritos em negrito.

Quadro 2 - Padrões Estaduais de Qualidade do Ar (D.E. 59113/2013)

Poluente	Tempo de Amostragem	MI 1 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	MI 2 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	MI 3 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	PF ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
partículas inaláveis (MP_{10})	24 horas MAA ¹	120 40	100 35	75 30	50 20
partículas inaláveis finas ($\text{MP}_{2,5}$)	24 horas MAA ¹	60 20	50 17	37 15	25 10
dióxido de enxofre (SO_2)	24 horas MAA ¹	60 40	40 30	30 20	20 -
dióxido de nitrogênio (NO_2)	1 hora MAA ¹	260 60	240 50	220 45	200 40
ozônio (O_3)	8 horas	140	130	120	100
monóxido de carbono (CO)	8 horas	-	-	-	9 ppm
fumaça* (FMC)	24 horas MAA ¹	120 40	100 35	75 30	50 20
partículas totais em suspensão* (PTS)	24 horas MGA ²	- -	- -	- -	240 80
chumbo** (Pb)	MAA ¹	-	-	-	0,5

Fonte: CETESB, 2014

Notas:

padrões vigentes em negrito.

¹ - Média aritmética anual.

² - Média geométrica anual.

* Fumaça e Partículas Totais em Suspensão - parâmetros auxiliares a serem utilizados apenas em situações específicas, a critério da CETESB.

** Chumbo - a ser monitorado apenas em áreas específicas, a critério da CETESB.

As Metas Intermediárias devem ser obedecidas em 3 (três) etapas, assim determinadas:

I. Meta Intermediária Etapa 1 - (MI1) - Valores de concentração de poluentes atmosféricos que devem ser respeitados a partir de 24/04/2013.

II. Meta Intermediária Etapa 2 - (MI2) - Valores de concentração de

poluentes atmosféricos que devem ser respeitados subsequentemente à MI1, que entrará em vigor após avaliações realizadas na Etapa 1, reveladas por estudos técnicos apresentados pelo órgão ambiental estadual, convalidados pelo CONSEMA – Conselho Estadual do Meio Ambiente.

III. Meta Intermediária Etapa 3 - (MI3) - Valores de concentração de poluentes atmosféricos que devem ser respeitados nos anos subsequentes à MI2, sendo que o seu prazo de duração será definido pelo CONSEMA, a partir do início da sua vigência, com base nas avaliações realizadas na Etapa 2.

Os Padrões Finais (PF) são aplicados sem etapas intermediárias quando não forem estabelecidas metas intermediárias, como no caso do monóxido de carbono, partículas totais em suspensão e chumbo. Para os demais poluentes, os padrões finais passam a valer a partir do final do prazo de duração do MI3.

Para cada poluente medido é calculado um índice de qualidade desenvolvido para simplificar a forma de divulgação da qualidade do ar. Tanto o cálculo do índice quanto os critérios de classificação da qualidade do ar foram alterados em função dos novos padrões estabelecidos no Decreto Estadual nº 59.113/2013. A classificação da qualidade do ar está associada a efeitos à saúde e, portanto, independe do padrão de qualidade em vigor. A relação entre índice, qualidade do ar e efeitos à saúde é apresentada no Quadro 3.

Quadro 3 - Índices de Qualidade do Ar utilizados pela CETESB

Qualidade	Índice	MP ₁₀ 24 h (µg/m³)	MP _{2,5} 24 h (µg/m³)	O ₃ 8 h (µg/m³)	CO 8 h (ppm)	NO ₂ 1 h (µg/m³)	SO ₂ 24 h (µg/m³)	Efeitos à Saúde
N1 - Boa	0 - 40	0 - 50	0 - 25	0 - 100	0 - 9	0 - 200	0 - 20	
N2 – Moderada	41-80	>50 - 100	>25 -50	>100 - 130	>9 - 11	>200 - 240	>20 - 40	Pessoas de grupos sensíveis (crianças, idosos e pessoas com doenças respiratórias e cardíacas) podem apresentar sintomas como tosse seca e cansaço. A população, em geral, não é afetada.
N3 – Ruim	81-120	>100 - 150	>50 - 75	>130 - 160	>11 - 13	>240 - 320	>40 - 365	Toda a população pode apresentar sintomas como tosse seca, cansaço, ardor nos olhos, nariz e garganta. Pessoas de grupos sensíveis (crianças, idosos e pessoas com doenças respiratórias e cardíacas) podem apresentar efeitos mais sérios na saúde.
N4 – Muito Ruim	121-200	>150 - 250	> 75 - 125	>160 -200	>13-15	> 320 - 1130	> 365 - 800	Toda a população pode apresentar agravamento dos sintomas como tosse seca, cansaço, ardor nos olhos, nariz e garganta e ainda falta de ar e respiração ofegante. Efeitos ainda mais graves à saúde de grupos sensíveis (crianças, idosos e pessoas com doenças respiratórias e cardíacas).
N5 – Péssima	>200	> 250	>125	> 200	> 15	> 1130	>800	Toda a população pode apresentar sérios riscos de manifestações de doenças respiratórias e cardiovasculares. Aumento de mortes prematuras em pessoas de grupos sensíveis.

Fonte: CETESB, 2014

1.6 OZÔNIO E SAÚDE

O crescente aumento das concentrações de substâncias contaminantes no meio aéreo, sua deposição no solo, nos vegetais e nos materiais é responsável por danos não só à saúde, mas também por reduções importantes na produção agrícola e de uma forma geral, desequilíbrios nos ecossistemas (MMA, 2015).

O ozônio troposférico é um poluente potencial dos grandes centros

urbanos, um dos principais que causam a degradação da qualidade do ar. Este poluente pode provocar, na saúde humana, irritação do sistema respiratório, causando tosse, sensação de irritação na garganta ou sensação de desconforto no peito. Pode, também, reduzir a função pulmonar tornando a respiração mais profunda e difícil, principalmente em atividades desenvolvidas ao ar livre (USEPA, 2013).

O ozônio pode danificar as células que revestem os pulmões e agravar doenças pulmonares crônicas como enfisema, bronquite e asma, reduzindo a capacidade do sistema imunológico de combater infecções bacterianas respiratórias. A exposição ao ozônio pode, também, aumentar o risco de morte prematura por doença cardíaca ou pulmonar. Muitos desses efeitos podem provocar maior ausência na escola e no trabalho e aumento de consultas médicas e internações em hospitais (USEPA, 2014).

As pessoas que vivem em áreas onde os níveis de ozônio são frequentemente altos podem achar que os sintomas iniciais desaparecem ao longo do tempo. No entanto, o ozônio pode continuar prejudicando os pulmões, mesmo quando os sintomas não são aparentes. Quando os níveis de ozônio estão elevados, uma das maneiras de proteger a saúde é tentar minimizar a exposição ao poluente como, por exemplo, evitar a realização de exercícios físicos nas horas mais críticas (USEPA, 2012).

Vale ressaltar que estudos sobre os poluentes atmosféricos, mais especificamente o ozônio, e seus efeitos adversos à saúde têm crescido consideravelmente nos últimos anos. O Quadro 4 mostra alguns desses estudos.

Quadro 4 – Alguns estudos que relacionam ozônio e outros poluentes atmosféricos e saúde

Autores e ano de publicação	Objetivo	Poluentes analisados	Período	Local	Resultados
MARTINS et al., 2002	Investigar os efeitos causados pela poluição atmosférica na morbidade por pneumonia e por gripe em idosos.	O ₃ , CO, SO ₂ , NO ₂ e MP ₁₀	1996 a 1998	Cidade de São Paulo	O ₃ e SO ₂ estavam diretamente associados à pneumonia e à gripe, independentemente das variáveis de controle.
CANGERANA-PEREIRA et al., 2005	Avaliar a influência dos poluentes do ar na incidência de câncer do trato respiratório.	O ₃ , MP ₁₀ , SO ₂ , NO _x , NO ₂ e CO	1981 a 1990	Em 12 distritos da cidade de São Paulo	O O ₃ foi o poluente que melhor correlacionou com a incidência do câncer do pulmão e do câncer de laringe. O resultado indicou que pode haver uma relação entre poluição atmosférica e incidência de câncer do trato respiratório.
FILLEUL et al., 2006	Analisar os efeitos do poluente ozônio na mortalidade.	O ₃	2003	Em 9 cidades francesas	O risco de morte foi significativo para um aumento de 10 µg/m ³ no nível de O ₃ .
BELL et al., 2007	Investigar os impactos na saúde humana decorrentes das concentrações de O ₃ .	O ₃	1993 a 1997	50 cidades do Leste dos Estados Unidos	Os níveis elevados de O ₃ corresponderam a um aumento de aproximadamente 0,11% para 0,27% na mortalidade total diária.
CAKMAK et al., 2007	Avaliar o aumento da mortalidade humana causada pelos poluentes atmosféricos.	O ₃ , SO ₂ , MP e CO	1997 a 2003	Em 7 centros urbanos do Chile	Os resultados apontaram aumento na mortalidade, associada ao aumento da taxa dos poluentes, principalmente dos idosos.
LIN et al., 2008	Verificar associação entre níveis elevados de O ₃ e internações de crianças em hospitais devido à asma.	O ₃	1995 a 1999	Estado de Nova York	A exposição ao O ₃ pode aumentar o risco de internações de crianças em hospitais, devido à asma.
MOURA et al., 2008	Avaliar a relação entre poluição do ar e efeitos respiratórios agudos em crianças, em três unidades de saúde pública.	O ₃ , MP ₁₀ , SO ₂ , NO ₂ e CO	abril de 2002 a março de 2003	Cidade do Rio de Janeiro	Apenas o O ₃ apresentou resultado positivo e estatisticamente significante, tanto com os atendimentos de emergência por problemas respiratórios, como os atendimentos motivados por sintomas nas vias aéreas inferiores.
HANSEN et al., 2010	Examinar potenciais associações entre a exposição aos poluentes atmosféricos e a qualidade dos espermatozoides de 228 homens.	O ₃ e MP _{2,5}	2002 a 2004	Em 3 condados dos Estados Unidos	Os resultados indicaram evidências de associação (estatisticamente não significante) da concentração de O ₃ e diminuição da contagem e concentração dos espermatozoides. Não ocorreu associação das características do sêmen com o MP _{2,5} .
CHOI et al., 2011	Examinar a associação entre os níveis de concentração de O ₃ e atendimentos hospitalares, em relação às condições respiratórias e cardiovasculares.	O ₃	2002	Maryland, Estados Unidos	O modelo de melhor ajuste apontou que um aumento de 10 ppb, na média de ozônio, em três dias, foi associado a um aumento de 2,4% no atendimento respiratório. Os atendimentos cardiovasculares também foram aumentados em 3,5%, em cinco dias, quando os níveis médios de ozônio foram aumentados em 10 ppb.

Estudos indicam, também, que níveis altos de ozônio podem prejudicar a vegetação. O ozônio provoca danos celulares das folhas, reduzindo as taxas de fotossíntese (SITCH et al., 2007), podendo reduzir seu crescimento, prejudicar a aparência e tornar mais suscetíveis a certas doenças e ataques de insetos (USEPA, 2014).

A Figura 2 mostra exemplares da variedade de tabaco *Nicotiana tabacum* Bel W3 com folhas saudáveis (à esquerda) e folha apresentando injúria foliar causada pelo efeito fitotóxico do ozônio (à direita). Esta variedade tem sido utilizada como bioindicador da presença de concentrações de ozônio.

Figura 2 – Exemplares de *Nicotiana tabacum* Bel W3

Fonte: CETESB, 2009

O estudo do comportamento das concentrações de ozônio é, portanto, muito importante para avaliar os impactos futuros sobre a saúde global, sendo necessárias ações de prevenção, controle e redução das emissões dos poluentes atmosféricos, que são seus precursores.

1.7 OZÔNIO NA REGIÃO METROPOLITANA DE SÃO PAULO

A Região Metropolitana de São Paulo (RMSP) contava com população estimada de 20,9 milhões de habitantes em 2014, segundo o IBGE, em uma superfície de 7.946 Km², com 39 municípios (EMPLASA, 2015).

Principal pólo econômico do país, a região é considerada como grande geradora de empregos, resultando na maior concentração populacional brasileira (EMPLASA, 2015).

A poluição atmosférica na RMSP é intensa, devido à quantidade de indústrias e veículos poluidores. A região conta com uma frota estimada em 7,3 milhões de veículos (CETESB, 2015) e aproximadamente 2.000 indústrias potencialmente poluidoras (CETESB, 2010).

A RMSP conta com 48% da frota do Estado concentrada em apenas 3,2% do território (CETESB, 2015).

Em 2014, a estimativa de emissão das fontes fixas e móveis, na RMSP, foi de aproximadamente 167 mil t/ano de monóxido de carbono (CO), 44 mil t/ano de hidrocarbonetos (HC), 80 mil t/ano de óxidos de nitrogênio (NO_x), 5mil t/ano de material particulado (MP) e 7 mil t/ano de óxidos de enxofre (SO_x). Desses totais, os veículos foram responsáveis por 97% das emissões de CO, 79% de HC, 68% de NO_x, 40% de MP e 22% de SO_x (CETESB, 2015).

Em termos de clima, a RMSP pode ser dividida em duas estações predominantes: uma estação chuvosa que compreende, normalmente, o

período de outubro a abril, e outra mais seca que vai de maio a setembro. A estação chuvosa está centrada nos meses de verão, quando ocorre uma elevação das temperaturas médias e uma maior ventilação. Neste período, o aquecimento continental, associado à convecção tropical, sistemas extratropicais (frentes frias) e áreas de instabilidade continental, favorecem o aumento da nebulosidade e da precipitação. Na estação seca o clima é determinado pela presença de anticiclones (sistemas de alta pressão) e pela passagem rápida de frentes frias provenientes do sul do continente, sendo esta estação caracterizada não só pela diminuição da precipitação, mas também pela queda das temperaturas e ocorrência de calmarias e períodos de grande estabilidade atmosférica, proporcionando com isso condições mais desfavoráveis à dispersão de poluentes na atmosfera. Outra característica do período seco é a baixa umidade relativa em alguns dias (CETESB, 2000).

A formação do ozônio depende da quantidade de gases precursores presentes na atmosfera e das condições meteorológicas como temperatura, direção e velocidade do vento, etc. O ozônio tem sido o poluente que mais ultrapassa os padrões de qualidade do ar no Estado de São Paulo. A RMSP apresenta um alto potencial de formação deste poluente, pois há grande emissão de seus precursores. Em função das complexas interações químicas e meteorológicas na formação e transporte do ozônio, não é possível inferir se o aumento dos níveis do poluente, nos últimos anos, na região, apresenta uma tendência ou se está relacionado às variações das condições meteorológicas, uma vez que as variações na quantidade de seus

precursores são pequenas ano a ano (CETESB, 2014).

As constantes ultrapassagens do padrão do ozônio têm ocasionado a realização de diversas pesquisas para avaliar e quantificar os efeitos no sistema global, cujas informações subsidiariam a tomada de decisões, na tentativa de minimizar estes efeitos nos seres vivos (SILVA JR e ANDRADE, 2013).

O ozônio, na RMSP, é medido pela CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo em 19 estações de monitoramento automático: Ibirapuera, Capão Redondo, Carapicuíba, Cidade Universitária USP-IPEN, Diadema, Guarulhos-Paço Municipal, Interlagos, Itaim Paulista, Itaquera, Mauá, Moóca, Nossa Senhora do Ó, Parelheiros, Parque D. Pedro II, Pinheiros, Santana, Santo Amaro, Santo André-Capuava e São Caetano do Sul.

Como exemplo, a Figura 3 mostra a estação de monitoramento automático Ibirapuera, localizada no interior do Parque do Ibirapuera, que mede concentrações de ozônio.

Figura 3 – Estação de monitoramento automático Ibirapuera

Fonte: CETESB, 2014

A Figura 4 mostra a localização das estações de monitoramento que medem ozônio na RMSP.

Figura 4 - Localização das estações de monitoramento de ozônio na RMSP

Fonte: CETESB, 2014

De maneira geral, a maioria dos dias com ultrapassagem do padrão ocorre nos meses de primavera e verão.

Embora os novos padrões estaduais tenham sido estabelecidos em 2013, a Figura 5 apresenta o número de dias em que o padrão de 8 horas do ozônio ($140\mu\text{g}/\text{m}^3$) teria sido ultrapassado na RMSP, ao longo dos anos, caso estivessem em vigor, considerando-se todas as estações de monitoramento que medem o ozônio na região.

Nos anos de 2011 e 2012 foram observados 49 dias de ultrapassagens do padrão estadual de qualidade do ar, na RMSP.

Observa-se, também, que 2014 está entre os anos com maior número de dias de ultrapassagem dos últimos sete anos, quando houve forte influência das condições meteorológicas como ausência de chuvas em dias consecutivos, dias com pouca nebulosidade e maior incidência de radiação solar, que propiciaram condições para a formação de altas concentrações deste poluente (CETESB, 2015).

Figura 5 - Evolução do número de dias de ultrapassagem do atual padrão estadual de ozônio*, na RMSP

*140 µg/m³ para exposição de 8 horas

Fonte: CETESB, 2015

A seguir é apresentado um resumo das condições meteorológicas que influenciaram o comportamento do ozônio na RMSP, no período de 2008 a 2014, tomando-se como base as análises dos relatórios de Qualidade do Ar

no Estado de São Paulo da CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015).

Em 2008 ocorreram muitos dias de precipitação, com muitas horas de nebulosidade, principalmente à tarde e consequente redução da radiação solar, nos meses de maior ocorrência de ozônio (janeiro-março e outubro-dezembro), portanto ocorreram menos eventos de altas concentrações do poluente na RMSP.

Em 2009 houve pequeno aumento na ocorrência de eventos de altas concentrações de ozônio, apesar do ano ter sido caracterizado como muito chuvoso na região, ocorrendo precipitações mensais acima das médias climatológicas, inclusive nos meses de setembro a dezembro. As precipitações foram ocasionadas por linhas de instabilidade que se formavam pela manhã nas regiões norte e noroeste do Estado deslocando-se na direção leste e sudeste, atingindo a RMSP somente no final da tarde, ocasionando aumento da nebulosidade. Porém, durante o dia houve radiação solar suficiente para a reação fotoquímica do ozônio.

Em 2010, os meses de janeiro a março, em que geralmente ocorrem altas concentrações de ozônio, foram chuvosos, com muitos dias de nebulosidade, reduzindo a radiação solar. Entretanto, os eventos meteorológicos que ocorreram em agosto e início de setembro tiveram grande influência no aumento das concentrações do poluente na RMSP, como também no restante do Estado.

Em 2011, embora as chuvas registradas no primeiro e quarto trimestre do ano terem sido próximas às normais climatológicas, podem ter

ocorrido no final da tarde, após o período do dia propício à formação de ozônio, já que foram registradas diversas ultrapassagens do padrão. No período de inverno verificou-se também episódios de ozônio, e uma possível explicação seria que nos meses de julho, agosto e setembro ocorreram longos períodos de estiagem na região, com a temperatura máxima superior à média climatológica em muitos dias. Foi observado, na RMSP, aumento de episódios de ultrapassagem do padrão de ozônio, em relação a 2010.

Em 2012, as precipitações registradas em janeiro, devidas em parte à atuação da Zona de Convergência do Atlântico Sul, ficaram bem acima das médias esperadas para o mês, podendo ter favorecido a formação de muita nebulosidade e, conseqüentemente, menor incidência solar. Estes fatos podem ter ocasionado menor número de ultrapassagens do padrão de qualidade do ar de ozônio. Nos meses de fevereiro e março as precipitações diminuíram, o que pode ter criado situações meteorológicas como a diminuição de nebulosidade e maior radiação solar incidente, favorecendo a formação de ozônio. De abril a junho, os índices pluviométricos foram superiores às normais climatológicas para esses meses. O período entre a segunda quinzena de julho até meados de setembro foi caracterizado por estiagem, com as médias das temperaturas superiores aos valores históricos em vários dias, com condições meteorológicas favoráveis à formação de ozônio. No último trimestre houve diminuição das precipitações e aumento da média das temperaturas máximas em relação às médias climatológicas desses meses, resultando em vários dias de ultrapassagem do padrão de qualidade de ozônio, especialmente no mês de outubro.

Em 2013, as condições meteorológicas no ano, de maneira geral, foram de ocorrência de chuvas organizadas e a consequente formação de nebulosidade, especificamente no primeiro e quarto trimestre do ano, quando geralmente ocorrem altas concentrações de ozônio. Estas condições inibiram a formação de ozônio em altas concentrações no ano, reduzindo o número de dias de ultrapassagem do padrão deste poluente.

Em 2014, as precipitações ocorridas durante os primeiros dez meses, na maior parte do tempo, ficaram abaixo das médias esperadas para cada mês. As médias das temperaturas máximas, nos meses de janeiro, fevereiro e outubro, foram superiores às normais climatológicas. Houve diminuição do número de dias com nebulosidade e maior incidência de radiação solar e condições propícias à formação de ozônio, principalmente no período entre o final de janeiro e início de fevereiro e entre o período de 8 a 19 de outubro.

Portanto, as condições meteorológicas indicaram que os anos de 2011, 2012 e 2014 foram mais os favoráveis à formação de ozônio na RMSP.

A Legislação Estadual estabelece também critérios para episódios críticos de poluição do ar, que são os estados de Atenção ($200 \mu\text{g}/\text{m}^3$), Alerta ($400 \mu\text{g}/\text{m}^3$) e Emergência ($600 \mu\text{g}/\text{m}^3$). A declaração destes estados requer, além dos níveis de concentração excedidos, a previsão de condições meteorológicas desfavoráveis à dispersão dos poluentes.

Quando estabelecido o estado de Atenção, devido ao ozônio, será solicitada a restrição voluntária do uso de veículos automotores particulares.

Quando declarado o estado de Alerta, devido ao ozônio, ficará

restringido o acesso de veículos automotores particulares em áreas estabelecidas em planos específicos.

Quando decretado o estado de Emergência, devido ao ozônio, fica proibida a circulação de veículos automotores particulares e de transporte de carga.

Com base nos novos padrões estabelecidos em 2013, nas Figuras 6 a 24 são mostradas a evolução do número de ultrapassagens do padrão de ozônio ($140 \mu\text{g}/\text{m}^3$) e nível de atenção estadual ($200 \mu\text{g}/\text{m}^3$), ambos de 8 horas, por estação de monitoramento da RMSP, no período de 2010 a 2014, caso estes padrões já estivessem em vigor. Para determinar as ultrapassagens do padrão e do nível de atenção foram calculadas médias móveis de 8 horas dos valores de ozônio.

Figura 6 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Capão Redondo

Fonte: CETESB, 2015

Figura 7 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Carapicuíba

Fonte: CETESB, 2015

Figura 8 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Cidade Universitária USP - IPEN

Fonte: CETESB, 2015

Figura 9 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Diadema

Fonte: CETESB, 2015

Figura 10 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Guarulhos - Paço Municipal

Fonte: CETESB, 2015

Figura 11 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Ibirapuera

Fonte: CETESB, 2015

Figura 12 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Interlagos

Fonte: CETESB, 2015

Figura 13 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2012 a 2014, na estação Itaim Paulista

Fonte: CETESB, 2015

Figura 14 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Itaquera

Fonte: CETESB, 2015

Figura 15 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Mauá

Fonte: CETESB, 2015

Figura 16 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Moóca

Fonte: CETESB, 2015

Figura 17 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Nossa Senhora do Ó

Fonte: CETESB, 2015

Figura 18 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Parelheiros

Fonte: CETESB, 2015

Figura 19 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Parque D. Pedro II

Fonte: CETESB, 2015

Figura 20 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Pinheiros

Fonte: CETESB, 2015

Figura 21 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Santana

Fonte: CETESB, 2015

Figura 22 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Santo Amaro

Fonte: CETESB, 2015

Figura 23 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação Santo André - Capuava

Fonte: CETESB, 2015

Figura 24 - Evolução do número de ultrapassagens (8 horas) do Padrão e do Nível de Atenção, de ozônio, no período de 2010 a 2014, na estação São Caetano do Sul

Fonte: CETESB, 2015

O início do monitoramento nas estações Carapicuíba, Interlagos e Guarulhos-Paço Municipal deu-se em 27/02/12; da estação Capão Redondo

em 01/09/12 e da estação Itaim Paulista em 03/07/12.

Pode-se observar que cada estação de monitoramento de ozônio, da RMSP, apresenta perfil diferente de evolução do número de ultrapassagens do poluente, ao longo dos anos. As variações podem estar relacionadas às diferentes características das fontes de emissão de cada localidade, a representatividade espacial das estações, aos sistemas meteorológicos como sistemas frontais e brisas marítimas associadas à topografia.

Estudos observacionais sobre a região indicam que a ocorrência de ventos fracos, principalmente, durante o período noturno e nas manhãs favorece a formação de concentrações altas de ozônio (CARVALHO et al., 2012).

Nas estações Carapicuíba, Cidade Universitária USP-IPEN, Interlagos e Santo Amaro, situadas de sudoeste a noroeste em relação à área central da RMSP, houve aumento significativo do número de ultrapassagens do padrão no período. O transporte do ozônio de outras localidades da RMSP para as estações mencionadas, considerando a atuação da brisa marítima poderia, em parte, explicar as ocorrências destas ultrapassagens.

A estação Ibirapuera apresentou muitas ultrapassagens do padrão durante o período, exceto no ano de 2013 onde as condições meteorológicas neste ano não favoreceram a formação de ozônio em concentrações elevadas.

Nas estações localizadas próximas de vias de tráfego veicular intenso, como Parelheiros e Pinheiros, são esperadas maiores concentrações de poluentes que são emitidas diretamente pelos veículos,

tais como CO e NO_x e concentrações mais baixas de ozônio devido ao seu consumo pelo NO. De forma inversa, nas estações mais distantes das vias de muito tráfego espera-se concentrações mais baixas de CO e NO devido à dispersão e melhores condições para a ocorrência de ozônio, devido à redução nas concentrações de NO.

Em decorrência das complexas interações químicas e meteorológicas envolvidas nas reações atmosféricas de formação e transporte de ozônio, não é possível observar uma tendência na concentração deste poluente ao longo dos anos (CETESB, 2014).

Entretanto, há alguns estudos europeus que analisam os valores do poluente distribuídos por faixa, em percentual, indicando se apresenta tendência de declínio ou aumento daquela faixa de valores (CEH, 2015).

No estudo realizado pelo CEH – *Centre for Ecology and Hydrology*, para toda a Europa, foi constatado que o aumento na faixa intermediária de valores de ozônio (entre 38 e 76 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) pode acarretar em aumento na média anual em uma determinada região, ao longo do tempo (CEH, 2015). Devido a este fato foi testado se o mesmo valia para a RMSP, conforme apresentado na Figura 25 com distribuição dos valores de concentrações horárias de ozônio (%), por faixas (0 – 37 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, 38 – 76 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, 77 – 115 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ e ≥ 116 $\mu\text{g}/\text{m}^3$), entre 2008 e 2014, na RMSP. Foram utilizados dados de ozônio medidos pela CETESB.

Figura 25 – Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na RMSP

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Para verificar a existência de tendência nas concentrações de ozônio na RMSP, foi aplicado o teste não paramétrico Mann-Kendall para todas as faixas de dados. Concluiu-se, então, que não houve tendência significativa em nenhuma das faixas, no período analisado.

A seguir são apresentados os gráficos de distribuição das concentrações de ozônio, por estação, da RMSP, no período de 2008 a 2014 (Figuras 26 a 44).

Figura 26 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Capão Redondo

Fonte: CETESB (2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 27 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Carapicuíba

Fonte: CETESB (2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 28 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Cidade Universitária USP - IPEN

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 29 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Diadema

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 30 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Guarulhos - Paço Municipal

Fonte: CETESB (2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 31 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Ibirapuera

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 32 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Interlagos

Fonte: CETESB (2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 33 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2012 e 2014, na estação Itaim Paulista

Fonte: CETESB (2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 34 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Itaquera

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 35 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Mauá

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 36 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Moóca

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 37 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Nossa Senhora do Ó

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 38 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Parelheiros

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 39 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Parque D. Pedro II

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 40 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Pinheiros

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 41 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Santana

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 42 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Santo Amaro

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 43 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação Santo André - Capuava

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

Figura 44 - Distribuição dos valores de ozônio (%), por faixa, entre 2008 e 2014, na estação São Caetano do Sul

Fonte: CETESB (2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015), dados brutos

As estações Capão Redondo, Carapicuíba, Guarulhos-Paço Municipal, Interlagos e Itaim Paulista apresentaram apenas 3 anos de dados, pois o início do monitoramento nessas estações se deu no ano de 2012 e, devido ao período de dados ser relativamente pequeno, não foi possível aplicar teste de tendência para os mesmos.

Verificou-se que a maioria das estações não apresentou tendência, exceto as estações Ibirapuera, Itaquera e Santana.

Para a estação Ibirapuera a análise apontou tendência de aumento na faixa de dados acima de 116 $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

A estação Itaquera apresentou tendência de declínio na faixa de valores entre 0 e 37 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ e tendência de aumento na faixa intermediária

(de 38 a 76 $\mu\text{g}/\text{m}^3$) e na faixa de valores acima de 116 $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

Na estação Santana foi verificada tendência de aumento na faixa de valores entre 38 e 76 $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

Nas estações próximas de vias de tráfego (estações veiculares), o perfil médio de concentrações de NO é elevado provavelmente em função da forte emissão dos veículos que circulam próximos e a concentração de ozônio é baixa, uma vez que é rapidamente consumida pelo NO.

Nas estações distantes de vias de tráfego (estações não veiculares), como Ibirapuera, Itaquera e Santana, a concentração média de NO do período da manhã geralmente é baixa, quando comparada às estações veiculares. No horário de formação do ozônio, a concentração de NO cai praticamente a zero e a concentração de NO₂ também diminui devido a sua fotólise (CETESB, 2000).

A análise de tendência indicou, portanto, que houve aumento significativo de ozônio, nas faixas de valores intermediários e de valores acima de 116 $\mu\text{g}/\text{m}^3$, em algumas estações que frequentemente apresentam muitos dias de ultrapassagens do padrão do poluente.

1.8 FONTES DE EMISSÃO DE POLUENTES NA RMSP

As fontes de emissão atmosféricas podem ser antropogênicas, ou seja, aquelas originadas pelas atividades humanas, tais como: queima de combustíveis fósseis (NO_x , CO, SO_2 , HC) e processos industriais (MP, SO_2 , NO_x); ou naturais como as erupções vulcânicas e incêndios de florestas (CO, NO_x , MP) (ÁLVARES JR et al., 2002).

As fontes móveis são do tipo difusas, não sendo usual a avaliação na base de fonte por fonte. A poluição do ar urbana atingiu seu ápice em decorrência da expansão experimentada pela indústria automobilística, constituindo-se em preocupação constante dos setores de meio ambiente e saúde. O aumento exponencial dos veículos em circulação, somado à deficiência crônica dos sistemas de transporte em massa, gera congestionamentos constantes e, conseqüentemente, a poluição atmosférica. As fontes com lançamento para a atmosfera por um ponto específico, como uma chaminé, por exemplo, são denominadas fontes fixas. As fontes fixas compreendem as que resultam dos processos produtivos industriais e dos processos de geração de energia, caso das termelétricas. Tais processos liberam para a atmosfera, conforme as matérias-primas utilizadas, diversas substâncias podendo apresentar elevada toxicidade (MMA, 2015).

Conforme já mencionado, em 2014, a estimativa de emissão das fontes fixas e móveis, na RMSP, foi de aproximadamente 167 mil t/ano de monóxido de carbono (CO), 44 mil t/ano de hidrocarbonetos (HC), 80 mil

t/ano de óxidos de nitrogênio (NO_x), 5mil t/ano de material particulado (MP) e 7 mil t/ano de óxidos de enxofre (SO_x). Desses totais, os veículos foram responsáveis por 97% das emissões de CO, 79% de HC, 68% de NO_x , 40% de MP e 22% de SO_x (CETESB, 2015). Os percentuais dos hidrocarbonetos e dos óxidos de nitrogênio, precursores de ozônio, foram altos e a redução destes valores poderia colaborar para diminuir as concentrações de ozônio na região.

No entanto, além da frota veicular e das bases de combustível, outras fontes de emissão de precursores de ozônio na RMSP são consideradas importantes, como as emissões evaporativas de combustíveis que ocorrem no momento do reabastecimento dos veículos e dos tanques de postos de venda de combustíveis, bem como de fontes industriais que emitem COVs e NO_x (CETESB, 2015).

Depois dos hidrocarbonetos, os aldeídos são os gases orgânicos mais abundantes na atmosfera (ALVIM, 2011). Estudos têm mostrado que o formaldeído é a espécie de carbonílicos mais abundante na atmosfera e em seguida, o acetaldeído (PEREIRA et al., 2001).

Os aldeídos são emitidos diretamente para a atmosfera por diversas fontes, destacando-se os veículos automotores. Também podem ser formados na atmosfera por meio de reações químicas, mediante a oxidação de hidrocarbonetos. Desempenham papel relevante na química da atmosfera podendo afetar a qualidade do ar como precursores de ozônio e na formação de aerossol orgânico em áreas urbanas, porém não existe padrão de qualidade do ar para os aldeídos na legislação brasileira. A

avaliação dos níveis de aldeídos na atmosfera, além de fornecer informações para a avaliação dos efeitos da exposição sobre a saúde da população, também é um indicativo da influência de fatores como renovação e aumento da frota de veículos e alterações na composição dos combustíveis (CETESB, 2015).

O formaldeído tem sido encontrado na atmosfera de diferentes locais, com uma ampla faixa de concentração. Em regiões urbanas, por exemplo, a concentração média varia de 20 a 75 ppb (PEREIRA et al., 2001).

Em 2014 e 2015, a CETESB mediu o formaldeído e acetaldeído, na estação de monitoramento Pinheiros, localizada a cerca de 250 metros da Marginal do rio Pinheiros, que tem influência significativa das emissões veiculares. Em 2015, a média das concentrações de formaldeído foi de 4 ppb e a média das concentrações de acetaldeído foi de 3 ppb. Em 2014, a média das concentrações foi de 3 ppb para ambos os poluentes.

Por outro lado, um estudo realizado por NOMI et al. (2005) em Hiroshima, Japão, no verão de 2005, encontrou intervalo de concentração de formaldeído de 1,55 a 4,12 ppb e intervalo de concentração de acetaldeído de 0,34 a 2,03 ppb.

Apesar de, provavelmente, indicarem características locais diferentes, as regiões de Pinheiros e Hiroshima apresentaram valores próximos de concentrações de formaldeído.

Em relação aos COVs e NO_x, várias simulações computacionais foram realizadas para avaliar a influência do acréscimo/decrécimo de suas concentrações na RMSP. Uma estratégia adequada para diminuir as

concentrações de ozônio seria reduzir as emissões de COVs. A mesma estratégia não seria válida para o NO_x, uma vez que a redução de suas concentrações aumentaria as concentrações de ozônio (ORLANDO et al., 2010).

Diante desta dificuldade em se reduzir os níveis de ozônio na RMSP, foi realizado, em 2006, estudo com o objetivo de apontar os principais COVs na cidade de São Paulo. Os dez compostos mais importantes na formação de ozônio encontrados na cidade foram: 1-buteno, eteno, formaldeído, acetaldeído, tolueno, 1-etil-4-metilbenzeno, trans-2-penteno, propeno, trans-2-buteno e 1-metilciclopenteno (ALVIM et al., 2011).

Dessa forma, o estudo e desenvolvimento de tecnologias para procurar reduzir os precursores de ozônio e a aplicação de medidas administrativas públicas, como o investimento e incentivo em sistemas de transporte público, por exemplo, poderiam colaborar na melhoria da qualidade do ar na região.

2. OBJETIVO

Esta pesquisa teve como objetivo elaborar e analisar simulações de previsão de concentração de ozônio troposférico para a Região Metropolitana de São Paulo.

3. MÉTODOS

Os processos que envolvem o transporte e a difusão de poluentes são numerosos e de grande complexidade, não sendo possível, muitas vezes, descrevê-los sem a utilização de modelos matemáticos. Estes resultam em um instrumento técnico indispensável para a gestão ambiental (MOREIRA, 2004).

Modelos de previsão da poluição do ar têm grande importância na ocorrência de um determinado episódio, antecipando precauções e providências no planejamento de ações públicas. Recentemente, vários algoritmos, como redes neurais artificiais (RNAs), são aplicados na modelagem da qualidade do ar (OZDEMIR et al., 2008).

Estas previsões são consideradas de grande importância, na medida em que podem ser inseridas na elaboração de estratégias de controle de emissões de poluentes e, também, na tomada de decisões em relação, principalmente, à saúde pública. Neste estudo serão utilizadas redes neurais como base dos modelos.

3.1. CARACTERÍSTICAS DOS MODELOS UTILIZADOS

Para ajustar um modelo capaz de prever, com antecedência de um dia, o nível de concentração máximo de ozônio na RMSP, foi utilizada a técnica de redes neurais artificiais (RNAs), considerando-se as seguintes variáveis como dados de entrada: temperatura, umidade relativa do ar,

cobertura de nuvem, componentes do vento: u (zonal) e v (meridional), pressão atmosférica, radiação solar, valores máximos diários do poluente ozônio e os dias da semana (0=segunda a sexta; 1=sábado e domingo).

O período do estudo foi de 2008 a 2014. Para realizar estudos de previsão um período mínimo de 3 anos de dados é considerado adequado para as análises (USEPA, 2013).

Foram elaborados ajustes para o ozônio considerando-se o padrão nacional de qualidade do ar (1 hora) e o padrão estadual de qualidade do ar (8 horas). Foram utilizadas médias móveis de 8 horas dos valores de ozônio, para o padrão estadual de qualidade do ar.

O programa de ajuste de redes neurais artificiais utilizado neste estudo foi desenvolvido pelos Professores Titulares Roberto Guardani e Claudio Augusto Oller Nascimento, do Laboratório de Simulação e Controle de Processos (LSCP), da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo - EPUSP (NASCIMENTO e GUARDANI, 2000).

Os dados das variáveis meteorológicas foram distribuídos entre as médias do período da manhã (07h às 12h) e as médias do período da tarde (13h às 18h), obtendo-se como saída as concentrações máximas de ozônio para o período da tarde.

Os dados meteorológicos foram coletados do modelo de previsão ETA, executado pelo CPTEC/INPE - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos/Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais e, também, da Estação meteorológica de observação de superfície automática Mirante de Santana, do INMET – Instituto Nacional de Meteorologia.

Para a variável dia da semana foi utilizado um índice binário indicando se o dia era útil ou não (0 para dias úteis e 1 para finais de semana).

Os dados dos valores máximos do poluente ozônio são referentes à estação de monitoramento Ibirapuera, medidos pela CETESB.

Esta estação, localizada em um parque na região central da área urbana, é considerada a mais representativa para estudos de previsão de concentrações de ozônio troposférico na RMSP, por apresentar índices elevados do poluente, possuir uma série extensa de dados, ser uma das mais completas em número de parâmetros monitorados e ser, estatisticamente, referência para toda a região (CETESB, 2000, GUARDANI, et al., 2003, BORGES, 2008).

Foram elaborados dois bancos de dados para a realização de testes de ajuste dos modelos: um com dados meteorológicos (previsão) do CPTEC/INPE e outro com dados meteorológicos (medidos) do INMET.

3.2. REVISÃO SISTEMATIZADA

Visando a análise e discussão dos resultados, são importantes a pesquisa e o conhecimento de publicações sobre o tema, o que pode ser feito por revisão sistemática. Contudo, para a realização de uma revisão sistemática é necessário seguir estratégias de busca, como o uso de banco de dados, definição de palavras-chave, seleção de critérios e operadores booleanos. Além disso, é preciso a manifestação de revisores externos, decorrente da própria metodologia (SIQUEIRA, 2015).

Neste estudo, adotou-se a revisão sistematizada em substituição à revisão sistemática, ou seja, utilizando-se da mesma metodologia da sistemática, com exceção da participação de revisores externos, pelas dificuldades inerentes a este processo.

Foi realizada uma pesquisa para identificação de artigos científicos, na base de dados Scopus, para o período de 10 anos (2006 a 2015).

As palavras-chave utilizadas compreenderam: *ozone*, *model* e *prediction*. Os operadores booleanos escolhidos foram *and* e *or*.

As estratégias de busca foram os seguintes: TITLE-ABS-KEY(ozone) AND TITLE-ABS-KEY(model) AND TITLE-ABS-KEY(prediction)) AND DOCTYPE(ar) AND SUBJAREA (MULT OR CENG OR CHEM OR COMP OR EART OR ENER OR ENGI OR ENVI OR MATE OR MATH OR PHYS) AND PUBYEAR > 2005.

A busca da pesquisa apontou 132 artigos, dos quais foram selecionados 50. Foram excluídos os artigos que apresentavam o ozônio somente como citação no texto, quando a metodologia não estava bem definida e aqueles que realizaram previsões somente de outros poluentes. Após esta revisão, 31 artigos foram identificados com o tema proposto.

Os artigos selecionados foram separados conforme a metodologia aplicada na previsão de ozônio, mostrados a seguir e, também, descritos sucintamente no Quadro 5.

Community Multiscale Air Quality (CMAQ) = 12 artigos

Redes Neurais Artificiais (RNAs) = 4 artigos

Weather Research and Forecasting - Chemistry (WRF/Chem) = 4 artigos

Modelo auto-regressivo integrado de média móvel (ARIMA) = 2 artigos

California Photochemical Grid (CALGRID) = 2 artigos

FUZZY = 1 artigo

Outros modelos = 6 artigos

Resumo dos artigos com aplicação do modelo CMAQ:

EDER et al. (2006): A Agência de Proteção Ambiental do Estados Unidos (USEPA), em parceria com National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) estavam desenvolvendo um sistema operacional de previsão de qualidade do ar, denominado AQF. Uma fase experimental do programa, com o modelo AQF acoplado ao modelo CMAQ, começou a operar em junho de 2004 e tem fornecido previsões de concentrações de ozônio no nordeste dos Estados Unidos. Foi realizada uma avaliação das previsões do modelo através de técnicas estatísticas, a fim de caracterizar o seu desempenho. Os resultados indicaram que o sistema AQF apresentou bom desempenho na temporada inaugural (coeficiente de correlação=0,59), apesar das condições frias e úmidas que não eram propícias à formação de ozônio. Devido à essas condições, em parte, o sistema AQF superestimou as concentrações resultando em um viés médio de 10,2 ppb. O modelo funcionou bem durante os períodos predominadas pelos anticiclones, caracterizados por apresentarem céu claro. Por outro lado, períodos caracterizados por formação de nuvens associados com frentes e/ou ciclones, resultou em desempenho não satisfatório. Assim, mudanças nas análises de nuvens estão em andamento para melhorar o desempenho do sistema AQF.

TONG e MAUZERALL (2006) avaliaram a capacidade do modelo CMAQ em simular a variabilidade espacial de ozônio nos Estados Unidos continentais. O melhor modelo simulou o ozônio para as concentrações intermediárias (40 – 60 ppbv), enquanto superestimou os níveis mais baixos. Para concentrações extremamente elevadas (490 ppbv), CMAQ subestimou os valores. Embora com as concentrações de ozônio superestimadas na região leste e subestimadas no oeste dos Estados Unidos, o modelo foi capaz de reproduzir valores máximos com viés entre 1 e 8 ppbv. O modelo subestimou valores observados nas áreas rurais e superestimou em áreas urbanas e suburbanas. Embora as concentrações de ozônio sejam de julho de 1996, o desempenho do modelo pode variar de acordo com a sazonalidade, resolução de grade e concentrações de outros poluentes. Uma avaliação mais completa seria necessária para estabelecer o desempenho do modelo em outros períodos.

YU et al. (2006) apresentaram os resultados da aplicação do sistema de modelagem CMAQ para previsão de ozônio no nordeste dos Estados Unidos, durante o New England Air Quality Study (NEAQS), em 2002. Este estudo também avaliou a capacidade de o modelo simular a distribuição do ozônio com base no conjunto de dados obtido nas quatro estações de análise e investigação atmosférica. Verificou-se que o modelo reproduziu 53,3 % do ozônio observado, com viés médio de 29,7% nos 342 locais de ozônio monitorado. O modelo reproduziu muito bem a distribuição espacial do ozônio para o horário das 15h, entre 08 e 12 de agosto, com viés médio de 20%. O desempenho do modelo para previsão de ozônio foi considerado

razoável.

ZHANG et al. (2006) descreveram a aplicação do modelo CMAQ para o sudeste dos Estados Unidos, no período de 01 a 10 de julho de 1999. As previsões avaliadas foram de ozônio, entre outros poluentes. A avaliação mostrou que o modelo tendeu a subestimar (entre 25% e 48%) os valores da máxima horária de ozônio, que poderia ser explicado por combinações de diversos fatores como incertezas nas emissões de precursores de ozônio e condições limitadas de formação de ozônio alto.

APPEL et al. (2007) examinaram várias simulações de previsão de ozônio com o modelo de CMAQ versão 4.5, com resolução de 12 Km na grade horizontal. O período analisado foi o verão (junho-agosto) de 2001 no leste dos Estados Unidos. Um teste de sensibilidade entre os mecanismos químicos mostrou que as previsões da média da máxima diária de ozônio, usando CB05, foram, em média, 7,3% maiores do que aqueles que utilizavam CB4. O desempenho do modelo revelou que o ozônio foi significativamente superestimado para concentrações abaixo de 35 ppb e subestimadas em concentrações acima de 85 ppb, com menor erro para a faixa de valores entre 35 e 85 ppb.

BYUN et al. (2007) avaliariam modelos de qualidade do ar para simular um episódio de concentração alta de ozônio nas cidades americanas de Houston, Galveston e Brazoria, no Estado do Texas, entre os dias 24 e 31 de agosto de 2000. Os modelos CMAQ e CAMx (Comprehensive Air Quality Model with Extensions) foram utilizados para determinar se as emissões de compostos orgânicos voláteis (COVs) eram consistentes com as condições

de poluição do ar observadas. O CMAx é um sistema de modelagem de avaliação integrada de gases e partículas de poluição do ar. Um dos principais objetivos do estudo foi determinar se as emissões no modelo CAMx produziram resultados de simulação semelhantes de qualidade do ar, quando utilizado o CMAQ. O conteúdo científico dos dois modelos é semelhante, mas o preparo dos dados de entrada e os detalhes de implantação dos modelos são diferentes. Os resultados dos testes indicaram que o modelo CMAQ foi inferior que o CAMx, no sentido de não prever eventos elevados de ozônio.

IRWIN et al. (2008) descreveram um procedimento de avaliação do modelo operacional CMAQ, no verão de 2002. Foram comparados quatro modelos, de acordo com seu mecanismo químico, variando o tamanho da grade. As simulações foram realizadas usando a versão 4.5, com pequenas diferenças nas configurações. Foram utilizados dados de concentração de ozônio de 242 pontos de monitoramento da região centro-leste dos Estados Unidos para a análise. Foram calculados percentis da distribuição de frequência destas concentrações e aplicada a técnica de Bootstrap, para caracterizar a variabilidade dos valores dos percentis observados. O processo de comparação de modelos de qualidade do ar estimulou discussões de como procedimentos semelhantes poderiam ser desenvolvidos e melhorados. O modelo com melhor desempenho apresentava configuração de 12 Km de grade e mecanismo químico SAPRC-99.

TONG et al. (2009) relataram estudo que avaliou o desempenho do modelo CMAQ considerando o ozônio cumulativo associado à exposição da

vegetação, usando observações de 1.024 monitores do poluente nos Estados Unidos Continentais. Esta exposição incluiu dois índices baseados na concentração de ozônio, M7 e M12 (médias diárias de ozônio das 7:00h e 12:00h, respectivamente). Também foram implantados outros três índices baseados em exposição cumulativa de ozônio: SUM06 (a soma de todas as concentrações horárias de ozônio maiores que 0,06 ppm), W126 (concentrações horárias ponderadas por uma função sigmoideal) e as concentrações de AOT40 (ozônio acumulado acima de 40 ppb durante o dia). Durante a simulação de três meses (julho a setembro de 2005), o modelo superestimou valores para M7 e M12 em 8 a 9 ppb, com erro médio de 2,1%. Para AOT40, SUM06 e W126, o valor do erro médio foi de duas a três vezes maior do que para M7 e M12. Gráficos de dispersão das máximas de concentração de ozônio mostraram que o desempenho do modelo variou de acordo com a região. Ao comparar os valores previstos com os medidos pelas estações de monitoramento, o modelo previu M7 e M12 com a mesma precisão da previsão de concentrações máximas de ozônio. A precisão do sistema foi de 96%, por outro lado a taxa de alarme falso foi de 82%.

CHEMEL et al. (2010) avaliaram o desempenho do sistema de modelagem CMAQ versão 4.6, para o ano de 2003. O modelo foi executado com 5km de resolução horizontal sobre a área total do Reino Unido. A avaliação do modelo foi considerando poluentes com padrões de qualidade do ar (ozônio e material particulado) e outros como NH_3 , SO_2 , NO_3 e NH_4 , comparados com as medições das redes urbana e rural do Reino Unido. As características do desempenho do modelo variaram também de acordo com

o tipo de localização (urbana ou rural). O resultado moderado para MP_{10} é refletido pelo desempenho moderado para NO_3 e NH_4 . Baixas correlações e desvio padrão alto para algumas variáveis, como por exemplo SO_2 , sugeriram que nesses locais as fontes não estavam bem descritas no modelo. Para o ozônio, as correlações entre os valores estimados e observados, variaram de 0,50 a 0,80 dependendo da localização. Em geral, o modelo superestimou os valores de ozônio.

LIU et al. (2010) aplicaram o modelo CMAQ para estudar as variações sazonais e mecanismos da formação dos principais poluentes atmosféricos. Maiores concentrações da maioria dos poluentes ocorrem ao longo do leste da China. O modelo CMAQ versão 4.7 foi aplicado sobre a Ásia Oriental para simulações de quatro meses (janeiro, abril, julho e outubro), no ano de 2008. Os campos meteorológicos foram gerados pela Pennsylvania State University/National Center for Atmospheric Research Mesoscale Modeling System Generation 5 (MM5). Em janeiro e julho os valores simulados de ozônio ficaram superestimados com viés médio de 12% e 19,3 %, respectivamente. Em abril e outubro, as concentrações foram bem simuladas.

PIERCE et al. (2010) avaliaram a dinâmica do sistema de modelagem CMAQ para o efeito do ozônio no fim de semana. Em muitas áreas urbanas dos Estados Unidos, valores altos de ozônio têm sido observados mais nos fins de semana do que durante a semana, apesar de ocorrer redução das emissões de precursores deste poluente. Foi utilizada uma série de 18 anos de dados (1988 a 2005) de ozônio e temperatura em todo o nordeste dos

Estados Unidos. O modelo mostrou habilidade em prever os valores absolutos das concentrações de ozônio durante o dia. No entanto, as concentrações de NO_x , do período da manhã, foram subestimados e os níveis de ozônio foram superestimados. As diferenças entre os valores máximos de ozônio de semana/final de semana diminuíram durante o período de 18 anos, nos observados e previstos. Apesar da tendência de queda das diferenças entre as observações e previsões do modelo (semana/final de semana), houve discrepâncias com relação às suas magnitudes absolutas. Este estudo revelou que o desempenho do modelo poderia ser melhorado estimando adequadamente as emissões de NO_x de origem móvel e suas distribuições temporais, especialmente de veículos a diesel e reduzindo o tamanho da grade na camada mais baixa no modelo CMAQ.

CHO et al. (2012) apresentaram estudo com aplicação do modelo CMAQ para simular emissões de ozônio e $\text{MP}_{2,5}$ em Alberta, Canadá. O método de exposição do ozônio SUM60 (soma do ozônio maior que 60 ppb) foi usado para estimar os efeitos na vegetação. O SUM60 foi calculado somando-se as concentrações horárias acima de 60 ppb acumuladas no dia, entre 8:00h e 20:00h. O modelo foi executado com uma resolução 36/12/4 Km, para o período de maio a agosto de 2002. Na região de areias betuminosas de Alberta, o modelo praticamente atingiu as metas de desempenho de previsão de ozônio, embora com um viés de subestimação de valores. A medida SUM60 foi quase sempre inferior a 100 ppb, abaixo do limite de preocupação para vegetação e culturas.

Resumo dos artigos com aplicação do modelo de RNAs:

GÓMEZ-SANCHIS et al. (2006) analisaram uma modelagem de ozônio utilizando redes neurais artificiais (RNAs), na cidade de Valencia, Espanha, no período de abril de 1997, 1999 e 2000. O trabalho foi especialmente focado na análise da importância das variáveis usadas no modelo. As variáveis de entrada foram: os meteorológicos (temperatura, velocidade do vento, umidade relativa, radiação solar e pressão atmosférica), NO e NO₂. A importância relativa das variáveis meteorológicas e de emissões de veículos na previsão de ozônio é de grande interesse para estabelecer medidas legislativas que permitam a redução do poluente. Em 1997, a influência de NO e NO₂ foi baixa, sugerindo que a formação de ozônio foi devido às variáveis meteorológicas. Ao contrário, ao longo de 1999 e 2000, a importância relativa de NO₂ foi maior. Os resultados demonstraram que os mecanismos envolvidos na formação de ozônio são complexos e dependentes da meteorologia.

HRUST et al. (2009) desenvolveram método para prever concentrações de ozônio em área residencial na cidade de Zagreb, Croácia. Um tipo de rede neural multilayer perceptron foi usado como modelo de previsão. O período do estudo iniciado em janeiro de 2004, considerou quase dois anos de dados de poluentes e meteorológicos. O desempenho do modelo indicou que o coeficiente de correlação ficou em torno de 0,84 e a temperatura foi uma das variáveis que mais afetaram o poluente.

BORGES et al. (2012) desenvolveram modelo utilizando redes neurais artificiais para prever a concentração de ozônio na Região Metropolitana de

São Paulo, considerando-se o período de janeiro de 1999 a dezembro de 2004. Os dados de entrada foram os valores médios das variáveis meteorológicas (temperatura, cobertura de nuvem, pressão atmosférica, umidade relativa, componentes zonal e meridional do vento e indicador de dia da semana) dos horários da manhã (8:00h – 12:00 h) e da tarde (13:00h – 17:00 h) e os de saída foram as concentrações médias e máximas de ozônio do período da tarde. Os resultados mostraram coeficientes de correlação, entre os valores previstos e medidos, de 0,82 e 0,88 para a concentração máxima e média de ozônio, respectivamente.

O modelo apresentou bom desempenho como ferramenta de previsão para a concentração máxima de ozônio.

KHATIBI et al. (2013) desenvolveram modelo de previsão de ozônio em Tabriz, Irã, usando cinco estratégias de modelagem. Foram três métodos de regressão: regressão linear múltipla (MLR), redes neurais artificiais (RNAs) e programação de expressão genética (GEP) e dois modelos do tipo auto-regressivo: previsão não-linear (PNL) e integrado de média móvel (ARIMA). Foram considerados os dados de temperatura, radiação solar e velocidade do vento, de agosto de 2010 a março de 2011. Os resultados das simulações mostraram que três deles apresentaram desempenho pouco satisfatório: MLR, RNAs e GEP. Os modelos restantes, PNL e ARIMA, apresentaram resultados promissores para capacidade preditiva de ozônio.

Resumo dos artigos com aplicação do modelo WRF/Chem:

TIE et al. (2009) verificaram a variabilidade do ozônio em Xangai, China.

Houve um evento no período de 10 dias (02 a 11 de agosto de 2007), onde os valores de ozônio ao meio-dia passaram de aproximadamente 100 a 130 ppbv para aproximadamente 20 a 30 ppbv, em Xangai. A fim de analisar esta rápida mudança do ozônio nesse curto período foi aplicado o modelo WRF/Chem para estudar a variabilidade do poluente. O WRF/Chem é um modelo de previsão climática e de poluentes atmosféricos gerado sob um sistema operacional flexível e analisa simultaneamente os módulos de meteorologia e química. O resultado mostrou que valores calculados e variações diurnas de ozônio estavam próximos dos medidos em locais da cidade, mas estavam subestimados em local industrial rural. A análise do modelo indicou que as condições meteorológicas desempenhavam papel importante na formação de ozônio na região de Xangai. Durante o verão havia um persistente sistema de alta pressão subtropical no sudeste de Xangai. Uma semana antes de ocorrer o evento, este sistema de alta pressão era fraco, resultando em ventos de superfície fracos. Com os ventos calmos, uma brisa do mar do meio-dia gerou um ciclo de direção de ventos. Como resultado, as concentrações elevadas de ozônio ficaram concentradas na região de Xangai, com valor máximo de 100 a 130 ppbv. No entanto, na semana do evento o sistema de alta pressão foi reforçado gerando ventos de superfície fortes e as altas concentrações de ozônio, formadas na cidade, foram transportadas para outras regiões, resultando em baixas concentrações em Xangai. Este estudo verificou que o modelo WRF/Chem foi uma ferramenta útil para estudar a variabilidade das concentrações de ozônio em Xangai e que, conseqüentemente, teve importante influência para

a predição de eventos do poluente.

CHUANG et al. (2011) descreveram estudo desenvolvido no sudeste dos Estados Unidos, considerando o período de maio a setembro de 2009, para o poluente atmosférico ozônio. Nesse trabalho, um novo sistema de previsão da qualidade do ar em tempo real foi desenvolvido com base na linha WRF/Chem com o modelo WRF/Chem-Madrid. O resultado foi uma superestimação do ozônio, podendo ser causada por inconsistências nas emissões, como as de compostos orgânicos voláteis biogênicos (COVBs) e imprecisões nas variáveis meteorológicas simuladas, como a temperatura e velocidade do vento.

YAHYA et al. (2014) utilizaram o modelo WRF/Chem-Madrid para prever as concentrações de ozônio, no sudeste dos Estados Unidos, nos meses de maio a setembro (2009 a 2011) e em três temporadas de estação inverno (dezembro a fevereiro). O modelo teve bom desempenho geral para ozônio nas temporadas de verão e inverno. Os resultados mostraram que o modelo superestimou valores de ozônio no verão de 2009. O erro médio variou de 18% a 27%, nos meses de maio a setembro.

GUPTA e MOHAN (2015) aplicaram o modelo WRF/Chem para simular o ozônio em Delhi, na Índia, durante o verão. O período de simulação é de 01 a 15 junho para os anos de 2007, 2008 e 2009. O modelo WRF/Chem inclui vários mecanismos químicos, dos quais foram utilizados dois: Carbon Bond Mechanism (CBMZ) e Regional Atmospheric Chemical Model (RACM). A temperatura foi uma variável muito importante na formação de ozônio. Os resultados mostraram que, para valores de ozônio baixos, o modelo não

funcionou bem e foi altamente satisfatório para níveis de ozônio moderados. Para valores altos foi considerado satisfatório. Observou-se que as concentrações de ozônio previstas tiveram melhor resultado com o mecanismo CBMZ. No geral, o desempenho do modelo foi considerado bom, com tendência a superestimar as concentrações de ozônio, exceto para valores abaixo de $20 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

Resumo dos artigos com aplicação do modelo ARIMA:

LIU (2007) comparou dois modelos para simular as concentrações máximas de ozônio em Ta-Liao, Taiwan, entre 1997 e 2001. Foram comparados os modelos ARIMA (auto-regressivo de média móvel) e RTSE (regressão com erro auto-regressivo). O modelo ARIMA subestimou consideravelmente as concentrações de ozônio maiores que 120 ppb. O modelo RTSE apresentou resultado satisfatório em simular as ultrapassagens de ozônio e mostrou-se superior ao ARIMA.

MELKONYAN et al. (2013) avaliaram a potencial formação de ozônio com a temperatura, com base em dados de duas estações de monitoramento (um de fundo industrial e outro rural), em North Rhine-Westphalia, Alemanha, para o período de 1983 a 2007. Considerando-se apenas a temperatura máxima diária com o valor máximo de ozônio, o coeficiente de correlação foi de 0,75. Uma projeção dos dias de ultrapassagem de ozônio foi feita usando a teoria da probabilidade e um modelo auto-regressivo integrado de séries temporais (ARIMA). Os resultados mostraram que, com aumento da temperatura de 3K, a frequência de dias em que o ozônio ultrapassa o valor

limite aumenta 135% na estação industrial e 87% na estação rural.

Resumo dos artigos com aplicação do modelo CALGRID:

CARRERAS-SOSPEDRA et al. (2006) avaliaram simulações de ozônio com o modelo da California Institute of Technology (CIT), para o ano de 2010, na Costa Sul da Califórnia, Estados Unidos. Os resultados mostraram que os valores máximos de concentração de ozônio simulados foram altamente sensíveis às condições meteorológicas, particularmente à temperatura. O modelo CIT previu concentrações de ozônio mais elevados do que os outros dois modelos considerados: California Photochemical Grid Model (CALGRID) e Urban Airshed Model (UAM). As simulações com os modelos CALGRID e UAM mostraram uma subestimação das concentrações de ozônio devido à utilização de mecanismos químicos com tendência a produzir concentrações baixas do poluente.

SCHIPA et al. (2011): nesse artigo, o sistema de modelagem CALMET/CALGRID foi usado para estimar as emissões e a distribuição espacial de poluentes atmosféricos em Apulia, região Sul da Itália. Os fatores de emissão foram usados para preparar um inventário de emissões que foram calculados e armazenados em bancos de dados de um GIS (Geographic Information System), para o ano de 2005. O uso de tecnologias de GIS permitiu o mapeamento das emissões e a comparação dos níveis de qualidade com as medições. Os resultados evidenciaram uma boa correlação entre os valores previstos e medidos de ozônio, com tendência a subestimar os dados medidos em estações urbanas.

Resumo dos artigos com aplicação do modelo FUZZY:

LIN e COBOURN (2007) descreveram um estudo de previsão de ozônio para seis regiões metropolitanas de Kentucky, Estados Unidos, para o período de 1999 a 2002, utilizando o sistema Fuzzy e modelo de regressão não linear (NLR). A modelagem Fuzzy é uma ferramenta destinada a utilizar a informação observada a partir de um fenômeno complexo para derivar um modelo quantitativo. É, também, um mapeamento não linear entre entradas e saídas. Foram dois tipos de modelos Fuzzy desenvolvidos nesse estudo: modelo básico (Basic-Fuzzy) e modelo não linear (Fuzzy-NLR). Para as previsões de ozônio, o modelo Fuzzy-NLR obteve estatísticas de desempenho equivalentes ou ligeiramente melhores do que as do modelo NLR e do modelo Basic-Fuzzy. O erro médio absoluto das previsões do modelo Fuzzy-NLR para as seis regiões metropolitanas foi de 7,7 ppb. Esta estatística foi comparável aos erros médios do modelo Basic-Fuzzy (8,0 ppb) e do modelo NLR (8,1 ppb). Na prática, os modelos têm o mesmo desempenho e, assim, a escolha de qual utilizar para aplicação na previsão da qualidade do ar deve ser baseada em outros fatores como experiência e disponibilidade do software.

Resumo dos artigos com aplicação de outros modelos:

DAWSON et al. (2008) aplicaram um sistema de modelagem denominado Global-Regional Climate Air Pollution Modeling System (GRE-CAPS) para simular concentrações de ozônio no leste dos Estados Unidos. As ligações fundamentais entre a meteorologia e o ozônio foram investigadas em uma

série de estudos de sensibilidade com o modelo Chemical Transport Model (CTM). O modelo GRE-CAPS foi usado para simular cinco janeiros e seis julho atuais. As concentrações previstas de ozônio foram comparadas aos dados medidos de 2001 a 2005. Os resultados mostraram que o desempenho do modelo foi considerado muito bom na previsão das concentrações de média da máxima diária e de máxima diária de ozônio, visto que os valores previstos estavam bem próximos dos medidos.

EDER et al. (2009) descreveram um estudo, cujo objetivo foi fornecer uma avaliação de desempenho do modelo CONUS-National Air Quality Forecast Capability (NAQFC). Essa avaliação se concentrou principalmente em previsões de ozônio, para o período de quatro meses (junho a setembro de 2007), abrangendo 48 estados americanos. Os resultados indicaram que o desempenho do NAQFC2007 foi tão bom ou superior que as configurações anteriores do modelo. O coeficiente de correlação, entre os valores de ozônio previstos e medidos, ao longo do verão foi de 0,70 e o erro médio foi de 20,4%. O modelo apresentou tendência de subestimar os valores quando as concentrações ultrapassavam 70 ppb.

WANG et al. (2011) descreveram um sistema de pré-tratamento de emissões denominado SMOKE-PRD (Sparse Matrix Operator Kernel Emissions) para dar suporte ao modelo de qualidade do ar em Pearl River Delta (PRD), China. O sistema foi desenvolvido com base no modelo USEPA/SMOKE. Um estudo de caso de simulação de ozônio foi conduzido para a região PRD durante o período de 01 a 30 de outubro de 2007. O modelo superestimou ligeiramente as concentrações de ozônio em locais

urbanos, mas subestimou em locais suburbanas ou rurais. O modelo também previu a maioria dos valores máximos de ozônio, durante os dias de episódios do poluente. Na maior parte das regiões de PRD, valores do coeficiente de correlação ficaram acima de 0,60, confirmando a boa concordância entre as concentrações simuladas e medidas. Estes resultados indicaram que o modelo teve bom desempenho em simular o ozônio no estudo de caso.

RAHMAN et al. (2012) investigaram o uso de modelos de redes abduativas para previsão de ozônio, em Empty Quarter (ou Rub'Al Khali), Arábia Saudita. O modelo de redes abduativas foi baseado no método de grupo de manipulação de algoritmo de dados, sintetizados automaticamente a partir de um banco de dados de entradas e saídas. Os dados utilizados foram os de concentrações de NO e NO₂ e os meteorológicos (direção e velocidade do vento, umidade relativa, temperatura e pressão), coletados entre 12 de junho e 12 de dezembro de 2007. Na primeira simulação entraram apenas dados meteorológicos e nas simulações seguintes as concentrações de NO e NO₂ foram introduzidas como entradas adicionais. A utilização de concentrações de NO e NO₂, juntamente com os dados meteorológicos, como variáveis de entrada melhorou a capacidade de generalização do modelo, que apresentou erro médio de 3,82%.

ZHANG et al. (2012) aplicaram Hidden Markov Model (HMM) para prever níveis de ozônio nas cidades americanas de Livermore Valley, perto de São Francisco e Houston, Texas. Foi proposto um método baseado em HMM com distribuição Gamma para superar as deficiências do HMM convencional

(HMM-Gaussian). Dados meteorológicos como velocidade do vento, temperatura, umidade relativa e radiação solar, de 2000 a 2007, foram usados para o treinamento do HMM. Os resultados mostraram que, comparado com HMM-Gaussian, no modelo HMM-Gamma houve redução da taxa de alarme falso de 11,65% para 2,63% em Livermore Valley. Também comparado com HMM-Gaussian, HMM-Gamma da região metropolitana de Houston reduziu a taxa de alarme falso de 11,48% para 7,79%.

GARNER e THOMPSON (2013) descreveram um conjunto de processadores de estatística (ESP) desenvolvido para o National Air Quality Forecast Capability (NAQFC) para prever ozônio em Baltimore, Estados Unidos. Dados meteorológicos e de qualidade do ar, de 2005 a 2011, foram coletados de oito estações de monitoramento na região de Baltimore. Estes dados foram utilizados para elaboração do ESP, através de modelos de árvores de regressão. Foram desenvolvidas cem árvores de regressão para cada monitor com um algoritmo moving-block. Os resultados indicaram árvores de regressão com caminhos dependentes da meteorologia, levando os nós a predizer as ultrapassagens de ozônio. O modelo apresentou tendência para superestimar a frequência das ultrapassagens de ozônio.

Consolidação de Informações

O Quadro 5, a seguir, apresenta as principais informações dos 31 artigos da revisão sistematizada.

Quadro 5 – Distribuição dos artigos da revisão sistematizada, por tipo de modelo de previsão e resultados obtidos

Modelo	Autores e ano de publicação	Período	Local	Resultados
CMAQ	EDER et al., 2006	junho de 2004	Nordeste dos Estados Unidos	O modelo apresentou coeficiente de correlação de 0,59, entre os valores previstos e medidos de ozônio e superestimou as concentrações.
	TONG e MAUZERALL, 2006	julho de 1996	Estados Unidos Continentais	O modelo subestimou valores de ozônio nas áreas rurais e superestimou valores em áreas urbanas e suburbanas. Uma avaliação mais completa seria necessária para verificar o desempenho do modelo em outros períodos.
	YU et al., 2006	2002	Nordeste dos Estados Unidos	O modelo reproduziu 53,3% do ozônio observado, com viés médio de 29,7% nos 342 locais monitorados. O desempenho do modelo foi considerado razoável.
	ZHANG et al., 2006	1999	Sudeste dos Estados Unidos	O modelo subestimou cerca de 25% a 48% dos valores máximos de ozônio, que poderia ser explicado por fatores como incertezas nas emissões de precursores de ozônio e condições de formação de valores altos do poluente.
	APPEL et al., 2007	junho a agosto de 2001	Leste dos Estados Unidos	Os valores de ozônio foram significativamente subestimados para concentrações acima de 85 ppb.
	BYUN et al., 2007	entre os dias 24 e 31 de agosto de 2000	Houston, Galveston e Brazoria, Estados Unidos	A comparação dos modelos mostrou que o CMAQ foi inferior que o CAMx, no sentido de não prever eventos elevados de ozônio.
	IRWIN et al., 2008	2002	Centro-leste dos Estados Unidos	Foram comparados quatro modelos, variando o tamanho da grade. Comparando-se os valores de percentis 90 de ozônio, observados e estimados, o modelo considerando 12 Km de grade e mecanismo químico SAPRC-99 foi o melhor.
	TONG et al., 2009	julho a setembro de 2005	Estados Unidos Continentais	A precisão do sistema de previsão de ozônio foi de 96%, porém a taxa de alarme falso foi de 82%.
	CHEMEL et al., 2010	2003	Reino Unido	Os coeficientes de correlação variaram de 0,50 a 0,80 dependendo da localização. Em geral, o modelo superestimou os valores de ozônio.
	LIU et al., 2010	janeiro, abril, julho e outubro de 2008	Leste da China	Nos meses de janeiro e julho, os valores simulados de ozônio foram superestimados, com viés médio de 12% e 19%, respectivamente. Em abril e outubro as concentrações foram bem simuladas.
	PIERCE et al., 2010	1988 a 2005	Nordeste dos Estados Unidos	As concentrações de ozônio foram superestimadas. O desempenho do modelo poderia ser melhorado estimando adequadamente as emissões de NO _x , especialmente de veículos a diesel.
RNAs	CHO et al., 2012	maio a agosto de 2002	Alberta, Canadá	O modelo praticamente atingiu as metas de desempenho de previsão do ozônio, embora tenha apresentado subestimação dos valores de ozônio.
	GÓMEZ-SANCHIS et al., 2006	abril de 1997, 1999 e 2000	Valencia, Espanha	O trabalho foi focado na análise da importância das variáveis usadas no modelo. Em 1997, a influência de NO e NO ₂ foi baixa sugerindo que a formação do ozônio foi devido às variáveis meteorológicas. Ao longo de 1999 e 2000, a importância de NO ₂ foi maior.
	HRUST et al., 2009	2004 a 2006	Zagreb, Croácia	O coeficiente de correlação, entre os valores previstos e medidos de ozônio, foi de 0,84. A temperatura foi uma das variáveis mais importantes do modelo.
	BORGES et al., 2012	1999 a 2004	Região Metropolitana de São Paulo	Os resultados indicaram coeficientes de correlação, entre valores previstos e medidos de ozônio, de 0,82 e 0,88 para a concentração máxima e a concentração média de ozônio, respectivamente.
	KHATIBI et al., 2013	agosto de 2010 a março de 2011	Tabriz, Irã	Três modelos apresentaram desempenho pouco satisfatório para a previsão do ozônio: regressão linear múltipla, redes neurais e programação de expressão genética. Os modelos ARIMA e previsão não-linear apresentaram resultados promissores.

continua

Quadro 5 – Distribuição dos artigos da revisão sistematizada, por tipo de modelo de previsão e resultados obtidos

continuação

Modelo	Autores e ano de publicação	Período	Local	Resultados
WRF/Chem	TIE et al., 2009	02 a 11 de agosto de 2007	Xangai, China	Os valores estimados da área urbana ficaram próximos dos medidos, enquanto que na área rural os valores foram subestimados. As variáveis meteorológicas foram importantes na formação do ozônio em Xangai.
	CHUANG et al., 2011	maio a setembro de 2009	Sudeste dos Estados Unidos	O resultado foi uma superestimação dos valores de ozônio, podendo ser causada por imprecisões de valores de temperatura e velocidade de vento.
	YAHYA et al., 2014	2009 a 2011	Sudeste dos Estados Unidos	O modelo superestimou valores do ozônio do verão de 2009.
	GUPTA e MOHAN, 2015	01 a 15 de junho (2007, 2008 e 2009)	Delhi, Índia	Os resultados mostraram que, para valores baixos de ozônio, o modelo não funcionou bem e foi altamente satisfatório para valores moderados. Para valores altos foi satisfatório. No geral, o modelo foi considerado bom, com tendência a superestimar os valores de ozônio. A temperatura foi uma variável muito importante no modelo.
CALGRID	CARRERAS-SOSPEDRA et al., 2006	2010	Califórnia, Estados Unidos	As simulações com os modelos CALGRID e UAM mostraram uma subestimação das concentrações do ozônio. A temperatura foi considerada importante na variação dos valores máximos de ozônio.
	SCHIPA et al., 2011	2005	Apulia, Itália	Os resultados evidenciaram boa correlação entre os valores previstos e medidos de ozônio, com tendência a subestimar as concentrações.
ARIMA	LIU, 2007	1997 a 2001	Ta-Liao, Taiwan	O modelo ARIMA subestimou consideravelmente as concentrações de ozônio maiores que 120 ppb.
	MELKONYAN et al., 2013	1983 a 2007	North Rhine-Westphalia, Alemanha	Os resultados indicaram que, com aumento da temperatura de 3K, a frequência de dias em que o ozônio ultrapassa o valor limite aumenta 135% na estação industrial e 87% na estação rural.
Árvores de Classificação e Regressão	GARNER e THOMPSON, 2013	2005 a 2011	Baltimore, Estados Unidos	Os resultados indicaram árvores de regressão com caminhos dependentes da meteorologia. O modelo apresentou tendência para superestimar a frequência das ultrapassagens de ozônio.
FUZZY	LIN e COBURN, 2007	1999 a 2002	Kentucky, Estados Unidos	O erro médio absoluto das previsões de ozônio pelo modelo Fuzzy-não linear para as seis regiões metropolitanas de Kentucky foi de 7,7 ppb.
Hidden Markov Model - Gamma	ZHANG et al., 2012	2000 a 2007	Livermore Valley e Houston, Estados Unidos	A taxa de alarme falso do modelo simulado para o ozônio em Livermore Valley foi de 2,63% e a taxa de alarme falso de Houston foi de 7,79%.
redes abduativas	RAHMAN et al., 2012	junho a dezembro de 2007	Empty Quarter, Arábia Saudita	A utilização de concentrações de NO e NO ₂ , no modelo, juntamente com os dados meteorológicos como dados de entrada melhorou a capacidade de previsão de ozônio que apresentou erro médio de 3,82%.
GRE-CAPS	DAWSON et al., 2008	2001 a 2005	Leste dos Estados Unidos	O desempenho do modelo foi considerado muito bom na previsão das concentrações da média da máxima diária e da máxima diária de ozônio.
NAQFC	EDER et al., 2009	junho a setembro de 2007	48 estados americanos	O coeficiente de correlação, entre os valores previstos e medidos de ozônio, foi de 0,70. O modelo apresentou tendência de subestimar os valores quando as concentrações ultrapassavam 70 ppb.
SMOKE	WANG et al., 2011	outubro de 2007	China	O modelo superestimou as concentrações de ozônio nas áreas urbanas e subestimou em áreas rurais. Valores de coeficiente de correlação, entre as concentrações previstas e medidas de ozônio, ficaram acima de 0,60. O modelo teve bom desempenho em simular o ozônio no estudo de caso.

3.3 DESCRIÇÃO DAS REDES NEURAIIS ARTIFICIAIS

As redes neurais artificiais (RNAs) são denominadas técnicas de inteligência artificial que possibilitam estudar fenômenos complexos, em que grande volume de dados pode ser modelado envolvendo, simultaneamente, aspectos estatísticos e computacionais, como os dinâmicos e de otimização (KOVÁCS, 2006).

Durante as últimas décadas, as pesquisas envolvendo as técnicas de inteligência artificial, como as redes neurais artificiais, vêm se expandindo rapidamente com aplicações em diversas áreas do conhecimento, como análises que envolvem classificação, controle ou predição (PALMA NETO e NICOLETTI, 2010).

A história das redes neurais artificiais contou, inicialmente, com trabalhos pioneiros dos neurofisiologistas Donald Hebb e Karl Lashley, por volta de 1940, quando as primeiras simulações foram feitas com papel e lápis. Hebb, com interesse em mecanismos de simulações, demonstrou que a capacidade de aprendizagem em redes neurais pode ser conseguida através da variação dos pesos das conexões entre os neurônios (LOESCH e SARI, 1995).

As pesquisas relatando o uso da metodologia de redes neurais em ferramentas de previsão de concentração do ozônio troposférico teve início a partir de 1995, com a publicação de RUIZ-SUÁREZ et al. (1995), aplicada à Cidade do México.

As redes neurais artificiais são consideradas sistemas de computação

que tentam simular a estrutura e função dos neurônios biológicos e, portanto, são capazes de modelar processos complexos não lineares. São geralmente constituídas por um número de elementos de processamento interconectados ou neurônios. O modo como as ligações interneuronais estão dispostas determinam a estrutura de uma rede (STATHOPOULOU et al., 2008).

De acordo com HAYKIN (1999), uma rede neural assemelha-se ao cérebro humano em dois aspectos:

- O conhecimento é adquirido pela rede de seu ambiente através de um processo de aprendizagem;
- As conexões interneuronais, que são como pesos sinápticos, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido. O processo de aprendizagem é chamado de algoritmo de aprendizagem, cuja função consiste em modificar os pesos sinápticos da rede, de maneira ordenada, para atingir um objetivo desejado.

Uma rede neural artificial, conforme ilustrada na Figura 45, pode ser vista como um conjunto de unidades de entrada, que podem ser conectadas em vários neurônios compostos por camadas ocultas onde cada ligação possui um peso associado resultando nas camadas de saída. Os neurônios que recebem diretamente as variáveis da rede determinam as chamadas camadas de entrada. As ocultas são aquelas consideradas intermediárias. As camadas são dispostas sucessivamente até as camadas de saída. Durante o processo de aprendizado, a rede ajusta pesos para classificar corretamente um objeto. É uma técnica que necessita de um longo período

de treinamento e ajustes finos dos parâmetros (CAMILO e SILVA, 2009).

Figura 45 - Estrutura de uma rede neural artificial

Fonte: BORGES, 2008

A rede neural possui três camadas: a camada de entrada de dados, a camada oculta e a camada de saída. A camada de entrada não executa nenhum processamento. Na camada oculta é realizada a maior parte do processamento, através das conexões ponderadas. Na camada de saída o resultado final é concluído e apresentado.

Os neurônios de uma camada são conectados a todos os neurônios da camada seguinte. A informação de um neurônio de uma camada (i) é ponderada por um dado peso (W_{ij}) somada a um termo independente de

correção (bias), da camada seguinte (j):

$$S_j = \sum_{i=1}^n W_{i,j} X_i + W_{n+1,j}$$

onde:

S_j = soma ponderada das entradas

W_{ij} = peso do i-ésimo neurônio e o j-ésimo neurônio

X_i = é a entrada do i-ésimo neurônio

A Figura 46 ilustra um neurônio de uma camada j.

Figura 46 – Ilustração de um neurônio de uma camada j

Fonte: NASCIMENTO, 2000

O_j representa a saída do neurônio, que é calculada pela expressão:

$$O_j = f(S_j)$$

A relação entre a entrada e a saída dos neurônios é expressa como uma função sigmoide:

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

A fase de treinamento ou aprendizado de uma rede neural artificial é determinada por uma adaptação dos pesos (W_{ij}).

O algoritmo de treinamento (ou aprendizado) de uma rede é um conjunto de regras, em que os pesos das conexões são ajustados, e para o ajuste é usado um conjunto de exemplos que representa a função a ser aprendida. Quando definida uma rede neural, na maioria das situações, não existe um modo de determinar o melhor número de camadas intermediárias, nem o número de neurônios em cada uma das camadas (PALMA NETO e NICOLETTI, 2010).

O algoritmo de treinamento mais estudado é conhecido como retropropagação (backpropagation). Esse algoritmo possibilita realizar os ajustes necessários à transmissão dos dados, permitindo formar previsões consistentes com o comportamento do período do estudo (BRESSAN, 2004).

Os pesos são ajustados, a partir dos dados de entrada, de maneira que minimizem os erros de previsão. Em cada interação os pesos são revisados, tentando atingir o mínimo possível destes erros.

Estes pesos são determinados de modo que, as respostas desejadas

sejam obtidas no neurônio de saída (ALMEIDA e PASSARI, 2006).

Para tentar eliminar problemas de convergência, todos os dados do conjunto de aprendizagem são normalizados entre zero e um.

Para a camada de saída, os pesos são alterados de acordo com as expressões:

$$\Delta w_{ij,k}^n = \eta \cdot \delta_{j,k} \cdot y_{i,k-1}$$

$$w_{ij,k}^{n+1} = w_{ij,k}^n + \Delta w_{ij,k}^n$$

$$\delta_{j,k} = \left(\frac{dy}{dz} \right)_{i,k} \cdot (y_{i,k} - y_{i,k}^T)$$

Onde:

η = fator de aprendizado ($0,01 \leq \eta \leq 1,00$)

$y_{i,k}$ = saída do neurônio i na camada k

$y^T_{i,k}$ = valor desejado para y^T

$w^n_{ij,k}$ = ponderação ligando o neurônio i na camada k-1 ao neurônio j na camada k no passo n

Nas camadas ocultas, a partir das ponderações temos:

$$\delta_{j,k} = \left(\frac{dy}{dz} \right)_{i,k} \left(\sum_j \delta_{j,k} w_{ij,k} \right)$$

$k = 1, 2, \dots, K-1$

Com a convergência ao mínimo, é obtida:

$$\Delta w_{ij,k}^{n+1} = \eta(\delta j, k \cdot y_{i,k-1}) + \alpha(\Delta w_{ij,k}^n)$$

$$w_{ij,k}^{n+1} = w_{ij,k}^n + \Delta w_{ij,k}^{n+1}$$

Durante o processo de aprendizagem, parâmetros como o número de neurônios da camada oculta, o número de apresentações dos pares de dados e o fator de aprendizado (η) são variados e o resultado é uma combinação de ajustes destes parâmetros. A rede é testada e validada comparando-se os valores de aprendizagem com os valores do conjunto de teste (GOB et al., 1999).

O conjunto de treinamento é utilizado para o ajuste dos parâmetros da rede, devendo conter um número significativo de casos de estudo. O conjunto de teste é utilizado para verificação do desempenho de generalização da rede (SANTOS et al., 2005).

Cerca de 60% a 90% do total de dados são usados para o aprendizado (SILVA et al., 2010).

Na maioria das situações, não existe uma maneira de determinar o melhor número de apresentações dos dados à rede e, tampouco, o número de neurônios da camada oculta (PALMA NETO e NICOLETTI, 2010).

Uma abordagem para a solução desse problema envolve a determinação da melhor estrutura de rede: as entradas ideais, a melhor combinação de funções de ativação nas camadas ocultas e de saída.

De acordo com SANTOS e CELESTE (2014), o número de neurônios

da camada oculta é determinado fazendo-se as simulações e verificando os melhores resultados. Por último, a camada de saída tem um único neurônio representando o ozônio previsto.

Na primeira etapa para avaliar uma categoria de previsão foi criada uma tabela de contingência, na qual é possível ter quatro resultados possíveis. É uma comparação entre os eventos de ultrapassagens do padrão de qualidade do ar considerando os valores observados (medidos) e os previstos (USEPA, 2013).

A Tabela 1 ilustra uma tabela de contingência com eventos observados e previstos. Esta tabela é a base para os cálculos das estatísticas de verificação da previsão, e é construída calculando-se a frequência de ocorrência de cada evento e dispondo-a na célula apropriada.

Tabela 1 - Exemplo de tabela de contingência

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	a	b
	SIM	c	d

Fonte: USEPA, 2013

De acordo com a USEPA (2013), um programa de previsão perfeito teria valores nas células "a" e "d", indicando eventos corretos, embora valores na célula "a" sejam geralmente mais frequentes e mais fácil de prever que os da célula "d". No mundo real, as previsões resultam em valores nas células "b" (falso alarme) e "c" (erros).

As estatísticas de verificação da previsão são os seguintes:

Precisão (A): Porcentagem de acertos nas previsões de eventos e não eventos.

$$A = (a+d)/N*100$$

Onde N = número de observações

Desvio (B): Indica, na média, se as previsões estão subestimadas ou superestimadas.

$$B = (b+d) / (c+d)$$

Valores próximos de 1 são melhores

Valores < 1 indicam subestimação

Valores >1 indicam superestimação

Taxa de Alarme Falso (FAR): Porcentagem de concentrações que foram previstas altas e que não ocorreram.

$$FAR = b / (b+d)*100$$

Probabilidade de Detecção (POD): Capacidade de prever altas concentrações (%).

$$POD = d / (c+d)*100$$

Correlação (r): Coeficiente de correlação entre o valor observado e o valor estimado.

$$r = \frac{n \cdot \sum (X.Y) - (\sum X) \cdot (\sum Y)}{\sqrt{n \cdot \sum X^2 - (\sum X)^2} \cdot \sqrt{n \cdot \sum Y^2 - (\sum Y)^2}}$$

n: número de pares (x,y)

$\sum(X.Y)$: efetuam-se os produtos x.y, referentes a cada par de observações e depois é realizado a soma

$\sum X$: soma dos valores da variável X

$\sum Y$: soma dos valores da variável Y

4. RESULTADOS

Foram realizados, no total, 311 testes distribuídos de acordo com o padrão de qualidade do ar para o ozônio (1 hora ou 8 horas) e a origem dos dados meteorológicos (CPTEC ou INMET), descritos a seguir.

Outros resultados de testes também são mostrados no Apêndice.

4.1 MODELAGEM APLICANDO PADRÃO DO OZÔNIO DE 1 HORA E DADOS DO CPTEC

Aplicando-se o modelo de redes neurais, considerando-se o padrão nacional de qualidade do ar do ozônio de 1 hora ($160 \mu\text{g}/\text{m}^3$) com dados do CPTEC, foram obtidos os resultados apresentados na Tabela 2.

Para o ajuste do modelo o conjunto de dados foi dividido em 1.384 dados para aprendizado e 692 para teste. O melhor ajuste foi obtido com os parâmetros $NH=8$, $\text{Eta}=0,06$ e $\text{NTMAX}=20.000$.

Tabela 2 – Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 1 hora e dados do CPTEC

Rede Neural						Correlação						Contingência			
						aprendizado			teste						
Teste	ETA	NTMAX	NVAR1	NVAR2	NH	R	a	b	Rt	at	bt	NN	NS	SN	SS
1	0,10	15000	13	1	6	0,69	0,53	38,7	0,65	0,49	43,4	1851	13	194	18
2	0,10	20000	13	1	6	0,71	0,51	29,7	0,66	0,49	33,1	1853	11	201	11
3	0,10	25000	13	1	6	0,69	0,48	33,1	0,65	0,46	38,3	1859	5	200	12
4	0,20	20000	13	1	6	0,70	0,52	27,5	0,65	0,51	30,4	1846	18	193	19
5	0,20	30000	13	1	7	0,71	0,50	34,2	0,65	0,47	39,8	1856	8	202	10
6	0,20	40000	13	1	8	0,71	0,49	29,9	0,64	0,45	35,5	1862	2	202	10
7	0,30	10000	13	1	8	0,71	0,49	34,9	0,66	0,47	37,8	1859	5	192	20
8	0,30	20000	13	1	8	0,73	0,52	30,2	0,65	0,47	37,9	1861	3	205	7
9	0,30	30000	13	1	8	0,72	0,53	28,5	0,61	0,48	36,1	1850	14	195	17
10	0,50	20000	13	1	9	0,73	0,52	32,0	0,64	0,49	36,6	1844	20	202	10
11	0,50	30000	13	1	9	0,74	0,55	27,6	0,63	0,49	36,0	1846	18	185	27
12	0,50	40000	13	1	9	0,70	0,49	35,3	0,64	0,48	38,5	1851	13	195	17
13	0,80	20000	13	1	10	0,74	0,54	28,0	0,60	0,48	37,0	1851	13	197	15
14	0,80	30000	13	1	10	0,72	0,53	31,9	0,65	0,50	36,7	1847	17	183	29
15	0,80	40000	13	1	10	0,74	0,58	25,9	0,62	0,51	34,3	1843	21	171	41
16	0,90	20000	13	1	11	0,72	0,54	26,0	0,65	0,51	30,3	1848	16	190	22
17	0,90	30000	13	1	11	0,74	0,56	25,6	0,62	0,50	34,4	1842	22	189	23
18	0,90	40000	13	1	11	0,72	0,54	24,0	0,60	0,49	31,5	1851	13	188	24
19	1,00	10000	13	1	12	0,73	0,53	25,5	0,65	0,49	31,8	1855	9	189	23
20	1,00	20000	13	1	12	0,72	0,56	29,2	0,61	0,51	36,9	1831	33	167	45
21	1,00	30000	13	1	12	0,72	0,55	21,8	0,64	0,51	27,6	1850	14	191	21
22	1,00	40000	13	1	12	0,74	0,56	24,5	0,64	0,50	33,7	1850	14	182	30
23	1,00	15000	13	1	10	0,72	0,56	25,6	0,63	0,51	33,1	1840	24	184	28
24	1,00	20000	13	1	11	0,74	0,57	25,6	0,59	0,50	35,7	1844	20	174	38
25	1,00	30000	13	1	13	0,75	0,59	19,8	0,63	0,52	29,4	1846	18	189	23
26	1,50	20000	13	1	15	0,74	0,60	16,1	0,60	0,51	29,0	1837	27	185	27
27	1,50	10000	13	1	15	0,73	0,56	26,6	0,63	0,50	35,7	1851	13	183	29
28	1,50	15000	13	1	15	0,73	0,55	22,3	0,60	0,47	31,4	1851	13	187	25

continua

Tabela 2 – Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 1 hora e dados do CPTEC

continuação

Rede Neural						Correlação						Contingência			
						aprendizado			teste						
Teste	ETA	NTMAX	NVAR1	NVAR2	NH	R	a	b	Rt	at	bt	NN	NS	SN	SS
29	0,05	10000	13	1	6	0,69	0,53	26,7	0,64	0,52	30,7	1849	15	185	27
30	0,05	15000	13	1	6	0,59	0,43	46,8	0,56	0,41	50,5	1852	12	195	17
31	0,05	20000	13	1	6	0,68	0,58	16,5	0,63	0,56	21,6	1839	25	177	35
32	1,00	10000	13	1	6	0,67	0,54	24,3	0,63	0,51	29,8	1837	27	179	33
33	1,00	15000	13	1	6	0,66	0,50	33,1	0,61	0,48	36,3	1850	14	184	28
34	1,00	20000	13	1	6	0,68	0,55	19,8	0,63	0,52	26,1	1844	20	182	30
35	0,05	10000	13	1	10	0,69	0,52	31,2	0,64	0,52	34,1	1847	17	189	23
36	0,05	15000	13	1	10	0,64	0,46	47,8	0,56	0,43	53,0	1844	20	186	26
37	0,05	20000	13	1	10	0,68	0,49	34,4	0,62	0,46	38,0	1856	8	191	21
38	1,00	10000	13	1	10	0,70	0,51	29,8	0,62	0,47	35,2	1854	10	199	13
39	1,00	15000	13	1	10	0,54	0,47	44,8	0,50	0,43	51,5	1814	50	190	22
40	1,00	20000	13	1	10	0,66	0,48	33,5	0,58	0,46	37,3	1849	15	191	21
41	0,01	5000	13	1	8	0,66	0,49	36,6	0,61	0,47	40,4	1846	18	187	25
42	0,06	20000	13	1	8	0,58	0,38	59,4	0,54	0,37	62,1	1823	41	166	46
43	0,06	30000	13	1	8	0,66	0,49	29,6	0,58	0,49	32,1	1849	15	196	16
44	0,07	10000	13	1	9	0,69	0,49	31,5	0,65	0,45	37,0	1859	5	200	12
45	1,00	10000	13	1	12	0,63	0,47	41,7	0,57	0,44	47,5	1839	25	179	33
46	1,00	15000	13	1	12	0,67	0,49	37,8	0,59	0,46	42,5	1848	16	181	31
47	1,00	10000	13	1	14	0,68	0,48	36,5	0,59	0,45	42,1	1850	14	201	11
48	1,00	20000	13	1	14	0,68	0,57	22,1	0,56	0,50	30,8	1843	21	199	13
49	1,00	15000	13	1	15	0,66	0,51	42,6	0,56	0,43	51,9	1823	41	170	42
50	1,00	20000	13	1	15	0,67	0,55	17,8	0,60	0,51	23,8	1849	15	198	14
51	1,00	30000	13	1	12	0,62	0,50	41,1	0,56	0,45	47,3	1829	35	179	33
52	0,06	15000	13	1	8	0,62	0,47	47,4	0,60	0,45	50,4	1851	13	182	30
53	0,08	15000	13	1	10	0,66	0,52	30,4	0,60	0,51	35,2	1844	20	192	20
54	0,04	15000	13	1	4	0,65	0,48	34,7	0,61	0,45	39,8	1859	5	209	3
55	0,03	20000	13	1	5	0,69	0,51	28,2	0,65	0,49	32,7	1854	10	195	17
56	0,02	30000	13	1	5	0,57	0,43	45,2	0,52	0,41	48,9	1850	14	191	21

Onde:

ETA: fator de aprendizado

NTMAX: número de apresentações

NVAR1: número de variáveis de entrada

NVAR2: número de variáveis de saída

NH: número de neurônios na camada oculta

NN: evento não observado e não previsto

NS: evento não observado, mas previsto

SN: evento observado e não previsto

SS: evento observado e previsto

Conjunto de aprendizado:

R: correlação

a: coeficiente angular

b: coeficiente linear

Conjunto de teste (t):

Rt: correlação

at: coeficiente angular

bt: coeficiente linear

A Figura 47 mostra a dispersão dos valores máximos de ozônio (observados e estimados), considerando-se todos os resultados de saída da RNA (teste + aprendizado).

Figura 47 – Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 1h e dados do CPTEC)

A Tabela 3 apresenta, para esta simulação, a comparação entre as ultrapassagens do padrão nacional de qualidade do ar considerando os valores observados e previstos.

Tabela 3 – Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 1h) e dados do CPTEC

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	1823	41
	SIM	166	46

Calculando-se as estatísticas de previsão, temos:

A = 90,0%

B = 0,41

FAR = 47,1%

POD = 21,7%

r = 0,6

Os resultados mostram que o modelo tem alta precisão (90%), ou seja, estima corretamente o evento ou não evento. O valor de B, menor que 1, indica valores subestimados. A taxa de alarme falso (FAR) mostrou que 47% das concentrações foram previstas como altas, mas não ocorreram. A habilidade de estimar eventos altos foi relativamente baixa (21,7%). O coeficiente de correlação foi moderado (0,60).

Uma noção da importância relativa das variáveis de entrada pode ser obtida observando-se a soma absoluta dos valores dos pesos entre as variáveis e os neurônios da camada oculta do modelo ajustado. Os pesos de cada variável de entrada estão indicados na Tabela 4.

Tabela 4 – Pesos das variáveis de entrada com dados de ozônio (padrão 1h) e dados do CPTEC

Variáveis de entrada		Soma dos pesos
manhã	temperatura	106,05
	umidade relativa	18,06
	cobertura de nuvem	36,70
	vento zonal (u)	25,57
	vento meridional (v)	12,98
	pressão atmosférica	34,67
tarde	temperatura	73,43
	umidade relativa	16,40
	cobertura de nuvem	24,45
	vento zonal (u)	20,58
	vento meridional (v)	0,48
	pressão atmosférica	43,59
	dia da semana	28,61

Os valores dos pesos indicam que a variável mais importante do modelo é a temperatura da manhã, quando começa a reação dos óxidos de nitrogênio (NO_x) e compostos orgânicos voláteis (COVs), confirmando a sua importância na formação de ozônio do período da tarde. A segunda variável mais importante é a temperatura da tarde.

4.2 MODELAGEM APLICANDO PADRÃO DO OZÔNIO DE 8 HORAS E DADOS DO CPTEC

Os resultados dos ajustes da rede neural, considerando-se o padrão estadual de qualidade do ar do ozônio de 8 horas ($140 \mu\text{g}/\text{m}^3$) com dados do CPTEC, estão na Tabela 5.

Tabela 5 – Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 8 horas e dados do CPTEC

Rede Neural						Correlação						Contingência			
Teste	ETA	NTMAX	NVAR1	NVAR2	NH	aprendizado			teste			NN	NS	SN	SS
						R	a	b	Rt	at	bt				
1	0,01	5000	13	1	8	0,67	0,49	25,2	0,60	0,44	27,6	1979	0	93	0
2	0,02	10000	13	1	2	0,70	0,49	37,1	0,67	0,49	35,5	1979	0	93	0
3	0,02	10000	13	1	4	0,70	0,48	34,4	0,67	0,48	32,9	1979	0	93	0
4	0,10	10000	13	1	2	0,72	0,49	28,7	0,68	0,48	28,5	1979	0	93	0
5	0,30	10000	13	1	2	0,70	0,47	23,6	0,66	0,46	23,4	1979	0	93	0
6	0,30	10000	13	1	4	0,72	0,50	23,2	0,67	0,47	24,0	1979	0	93	0
7	0,30	5000	13	1	8	0,74	0,53	23,2	0,66	0,49	25,5	1979	0	93	0
8	0,30	10000	13	1	8	0,75	0,56	22,1	0,66	0,51	24,3	1979	0	93	0
9	0,30	20000	13	1	8	0,76	0,55	21,0	0,66	0,48	24,8	1978	1	92	1
10	0,30	30000	13	1	8	0,76	0,57	22,2	0,67	0,50	25,8	1979	0	92	1
11	1,00	20000	13	1	8	0,74	0,57	22,3	0,67	0,52	23,6	1974	5	88	5
12	0,10	20000	13	1	13	0,74	0,54	22,8	0,65	0,48	25,5	1978	1	93	0
13	0,50	20000	13	1	15	0,77	0,58	18,3	0,65	0,50	23,3	1978	1	92	1
14	1,00	20000	13	1	6	0,71	0,52	17,4	0,56	0,46	21,5	1975	4	91	2
15	1,00	20000	13	1	13	0,74	0,54	25,3	0,61	0,47	29,5	1978	1	93	0
16	1,00	20000	13	1	6	0,67	0,48	15,5	0,62	0,45	16,7	1979	0	93	0
17	1,00	10000	13	1	1	0,63	0,29	29,6	0,62	0,29	29,2	1979	0	93	0
18	1,00	20000	13	1	2	0,61	0,39	21,2	0,57	0,38	21,0	1979	0	93	0
19	1,00	30000	13	1	3	0,67	0,47	27,5	0,60	0,43	29,4	1979	0	93	0
20	0,10	10000	13	1	8	0,74	0,57	21,2	0,64	0,51	24,3	1976	3	90	3
21	0,10	20000	13	1	6	0,73	0,52	28,6	0,65	0,48	30,8	1979	0	93	0
22	0,10	30000	13	1	10	0,73	0,56	24,1	0,62	0,49	28,5	1978	1	90	3
23	0,20	10000	13	1	2	0,69	0,45	24,8	0,65	0,44	24,8	1979	0	93	0
24	0,20	20000	13	1	4	0,71	0,50	23,6	0,66	0,46	25,3	1979	0	93	0
25	0,20	30000	13	1	6	0,70	0,50	25,2	0,63	0,46	27,1	1979	0	93	0
26	0,30	20000	13	1	8	0,73	0,54	24,1	0,63	0,48	27,5	1974	5	90	3
27	0,30	25000	13	1	8	0,76	0,61	18,2	0,66	0,54	21,7	1978	1	90	3
28	0,30	30000	13	1	8	0,75	0,55	23,5	0,66	0,49	26,4	1978	1	90	3
29	0,50	20000	13	1	9	0,73	0,55	22,0	0,64	0,49	25,0	1979	0	92	1
30	0,50	25000	13	1	9	0,74	0,58	20,9	0,64	0,50	25,2	1978	1	92	1
31	0,50	30000	13	1	9	0,75	0,57	19,7	0,65	0,52	23,0	1979	0	92	1
32	0,80	20000	13	1	10	0,77	0,62	16,9	0,66	0,53	21,5	1979	0	88	5
33	0,80	25000	13	1	10	0,77	0,61	18,5	0,65	0,53	22,9	1978	1	88	5
34	0,80	30000	13	1	10	0,75	0,59	24,2	0,64	0,50	28,9	1972	7	84	9
35	0,90	20000	13	1	11	0,77	0,61	17,8	0,67	0,55	21,4	1979	0	92	1
36	0,90	25000	13	1	11	0,76	0,59	20,2	0,65	0,52	24,9	1979	0	92	1
37	0,90	30000	13	1	11	0,76	0,57	22,7	0,67	0,51	26,0	1977	2	91	2
38	1,00	15000	13	1	12	0,76	0,58	24,2	0,65	0,52	27,5	1978	1	91	2
39	1,00	20000	13	1	12	0,73	0,54	23,9	0,61	0,46	28,5	1978	1	90	3
40	1,00	25000	13	1	12	0,76	0,57	21,2	0,63	0,50	25,0	1979	0	92	1
41	1,00	2000	13	1	8	0,70	0,49	29,5	0,63	0,44	31,7	1979	0	93	0
42	1,00	2000	13	1	5	0,70	0,48	33,0	0,64	0,45	34,5	1979	0	93	0
43	0,20	15000	13	1	3	0,67	0,44	29,8	0,61	0,41	30,5	1979	0	93	0

continua

Tabela 5 – Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 8 horas e dados do CPTEC

continuação

Rede Neural						Correlação						Contingência			
Teste	ETA	NTMAX	NVAR1	NVAR2	NH	aprendizado			teste			NN	NS	SN	SS
						R	a	b	Rt	at	bt				
44	0,10	20000	13	1	4	0,68	0,46	26,2	0,62	0,43	27,1	1979	0	93	0
45	0,10	30000	13	1	5	0,69	0,47	28,7	0,61	0,42	30,8	1979	0	93	0
46	0,70	30000	13	1	14	0,72	0,56	22,0	0,58	0,47	26,7	1973	6	89	4
47	0,50	20000	13	1	15	0,77	0,62	16,3	0,61	0,53	22,3	1978	1	91	2
48	0,60	15000	13	1	16	0,77	0,61	20,3	0,61	0,52	26,0	1974	5	86	7
49	0,70	10000	13	1	3	0,70	0,49	26,8	0,65	0,46	27,9	1979	0	93	0
50	0,05	15000	13	1	7	0,70	0,49	29,1	0,62	0,45	31,3	1979	0	93	0
51	0,08	20000	13	1	7	0,70	0,48	32,9	0,60	0,43	36,0	1979	0	93	0
52	0,80	20000	13	1	12	0,73	0,56	23,1	0,61	0,48	27,6	1975	4	92	1
53	0,80	25000	13	1	12	0,76	0,60	18,9	0,62	0,51	24,6	1975	4	87	6
54	0,80	30000	13	1	12	0,75	0,57	25,2	0,61	0,48	30,5	1977	2	92	1
55	0,80	15000	13	1	12	0,75	0,58	19,2	0,63	0,50	23,4	1978	1	91	2
56	0,90	15000	13	1	16	0,75	0,58	21,7	0,61	0,49	26,9	1976	3	92	1
57	0,90	20000	13	1	16	0,76	0,61	15,5	0,63	0,53	20,5	1976	3	90	3
58	0,90	25000	13	1	16	0,79	0,62	18,1	0,64	0,54	23,2	1979	0	90	3
59	0,60	40000	13	1	10	0,74	0,55	25,1	0,62	0,48	29,0	1979	0	93	0
60	0,60	30000	13	1	10	0,71	0,53	27,1	0,58	0,45	31,7	1977	2	90	3
61	0,60	25000	13	1	10	0,75	0,56	27,2	0,62	0,50	30,7	1978	1	92	1
62	0,70	10000	13	1	16	0,75	0,54	26,7	0,62	0,46	31,4	1978	1	92	1
63	0,80	15000	13	1	16	0,76	0,59	14,4	0,62	0,51	19,6	1978	1	93	0
64	0,90	20000	13	1	16	0,75	0,60	21,6	0,62	0,51	26,7	1964	15	88	5
65	0,06	20000	13	1	15	0,76	0,60	20,2	0,61	0,52	24,5	1977	2	91	2
66	0,07	30000	13	1	15	0,74	0,59	19,0	0,58	0,49	26,3	1975	4	92	1
67	0,08	35000	13	1	15	0,72	0,55	26,1	0,55	0,45	32,0	1974	5	90	3
68	1,00	30000	13	1	11	0,73	0,56	21,0	0,62	0,49	25,1	1978	1	89	4
69	1,00	30000	13	1	12	0,76	0,59	18,3	0,61	0,50	23,2	1976	3	89	4
70	1,00	30000	13	1	13	0,78	0,64	13,3	0,61	0,54	19,1	1978	1	87	6
71	0,50	20000	13	1	13	0,76	0,63	12,8	0,65	0,56	16,7	1979	0	89	4
72	0,70	25000	13	1	13	0,76	0,55	21,2	0,63	0,48	26,5	1979	0	92	1
73	0,90	30000	13	1	13	0,76	0,59	21,6	0,61	0,50	27,6	1979	0	92	1
74	0,05	30000	13	1	3	0,67	0,44	29,9	0,61	0,42	30,5	1979	0	93	0
75	0,06	35000	13	1	4	0,68	0,45	30,8	0,60	0,40	32,7	1979	0	93	0
76	0,07	40000	13	1	5	0,74	0,56	19,3	0,66	0,52	21,3	1979	0	93	0
77	0,10	20000	13	1	12	0,76	0,57	22,6	0,62	0,47	28,2	1977	2	93	0
78	0,20	30000	13	1	13	0,76	0,57	19,6	0,61	0,48	24,9	1978	1	92	1
79	0,30	35000	13	1	14	0,73	0,58	22,0	0,61	0,49	28,3	1972	7	86	7
80	0,90	15000	13	1	12	0,75	0,55	22,7	0,63	0,47	27,1	1979	0	92	1
81	0,90	20000	13	1	12	0,75	0,57	22,9	0,61	0,49	27,9	1978	1	92	1
82	0,90	25000	13	1	12	0,77	0,62	19,7	0,60	0,52	25,9	1976	3	89	4
83	1,00	20000	13	1	8	0,70	0,51	26,7	0,61	0,46	30,0	1979	0	93	0
84	1,00	30000	13	1	9	0,76	0,57	21,7	0,63	0,50	26,6	1979	0	92	1
85	1,00	40000	13	1	10	0,76	0,62	14,2	0,64	0,55	18,3	1978	1	89	4
86	1,00	40000	13	1	13	0,75	0,56	22,9	0,57	0,45	29,8	1979	0	92	1

Onde:

ETA: fator de aprendizado	NN: evento não observado e não previsto
NTMAX: número de apresentações	NS: evento não observado, mas previsto
NVAR1: número de variáveis de entrada	SN: evento observado e não previsto
NVAR2: número de variáveis de saída	SS: evento observado e previsto
NH: número de neurônios na camada oculta	

Conjunto de aprendizado:	Conjunto de teste (t):
R: correlação	Rt: correlação
a: coeficiente angular	at: coeficiente angular
b: coeficiente linear	bt: coeficiente linear

O conjunto de dados foi dividido em 1.382 dados para aprendizado e 690 para teste. O melhor ajuste foi obtido com os parâmetros NH=13, Eta=1 e NTMAX=30.000.

Na Figura 48 é mostrada a dispersão dos valores máximos de ozônio (medidos e estimados), considerando-se todos os resultados de saída da RNA (teste + aprendizado).

Figura 48 – Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 8h e dados do CPTEC)

A Tabela 6 apresenta, para esta simulação, a comparação entre as ultrapassagens do padrão estadual de qualidade do ar considerando os valores observados e previstos.

Tabela 6 – Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 8h) e dados do CPTEC

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	1978	1
	SIM	87	6

Calculando-se as estatísticas de previsão, temos:

A = 95,8%

B = 0,1

FAR = 14,3%

POD = 6,5%

r = 0,72

O modelo apresenta, no geral, alto percentual de acerto (95,8%). O valor de B indica subestimação dos valores. Cerca de 14,3% das concentrações que foram previstas altas não ocorreram. A capacidade de prever altos valores foi de 6,5% e o coeficiente de correlação foi 0,72. Os pesos de cada variável de entrada estão indicados na Tabela 7.

Tabela 7 – Pesos das variáveis de entrada com dados de ozônio (padrão 8h) e dados do CPTEC

Variáveis de entrada		Soma dos pesos
manhã	temperatura	3,85
	umidade relativa	14,46
	cobertura de nuvem	5,89
	vento zonal (u)	7,45
	vento meridional (v)	76,68
	pressão atmosférica	63,60
tarde	temperatura	89,31
	umidade relativa	19,46
	cobertura de nuvem	59,78
	vento zonal (u)	76,60
	vento meridional (v)	48,56
	pressão atmosférica	14,58
	dia da semana	16,88

Os valores dos pesos das variáveis mostram que a temperatura da tarde é a mais importante do modelo.

4.3 MODELAGEM APLICANDO PADRÃO DO OZÔNIO DE 1 HORA E DADOS DO INMET

Os resultados dos ajustes da rede neural, considerando-se o padrão nacional de qualidade do ar do ozônio de 1 hora ($160 \mu\text{g}/\text{m}^3$) com dados do INMET, estão apresentados na Tabela 8.

Tabela 8 – Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 1 hora e dados do INMET

Rede Neural						Correlação						Contingência			
Teste	ETA	NTMAX	NVAR1	NVAR2	NH	aprendizado			teste			NN	NS	SN	SS
						R	a	b	Rt	at	bt				
1	0,01	5000	12	1	7	0,85	0,69	25,0	0,84	0,68	24,8	2093	15	176	45
2	0,01	5000	12	1	6	0,84	0,70	20,5	0,85	0,69	20,3	2092	16	175	46
3	0,02	5000	12	1	8	0,84	0,65	29,0	0,84	0,63	30,3	2097	11	181	40
4	0,02	10000	12	1	8	0,84	0,66	28,7	0,84	0,65	28,3	2097	11	177	44
5	0,03	10000	12	1	10	0,85	0,69	23,0	0,83	0,67	24,1	2095	13	169	52
6	0,04	10000	12	1	10	0,85	0,65	25,6	0,83	0,62	26,8	2099	9	188	33
7	0,05	15000	12	1	9	0,83	0,69	21,5	0,81	0,64	25,1	2100	8	195	26
8	0,03	20000	12	1	9	0,85	0,71	20,2	0,83	0,70	20,3	2085	23	165	56
9	0,03	25000	12	1	9	0,85	0,68	26,4	0,83	0,68	25,8	2087	21	163	58
10	0,03	30000	12	1	9	0,84	0,69	17,8	0,82	0,65	20,9	2100	8	194	27
11	0,03	25000	12	1	9	0,83	0,63	34,9	0,79	0,58	38,0	2098	10	196	25
12	0,01	20000	12	1	3	0,80	0,59	42,9	0,82	0,60	41,5	2057	51	140	81
13	0,01	20000	12	1	4	0,83	0,66	28,6	0,84	0,66	28,3	2068	40	146	75
14	0,01	20000	12	1	5	0,82	0,61	30,9	0,83	0,61	29,2	2092	16	180	41
15	0,01	20000	12	1	6	0,85	0,71	17,1	0,85	0,71	16,7	2082	26	158	63
16	0,01	20000	12	1	7	0,85	0,70	20,2	0,81	0,67	22,2	2085	23	155	66
17	0,01	20000	12	1	8	0,85	0,67	25,0	0,83	0,67	24,8	2087	21	163	58
18	0,01	20000	12	1	9	0,85	0,69	28,3	0,82	0,68	29,0	2073	35	137	84
19	0,01	20000	12	1	10	0,84	0,67	21,6	0,82	0,67	20,9	2086	22	165	56
20	0,01	20000	12	1	11	0,84	0,67	20,9	0,81	0,65	22,3	2089	19	161	60
21	0,01	20000	12	1	12	0,85	0,67	22,7	0,81	0,66	23,0	2091	17	168	53
22	0,02	20000	12	1	13	0,85	0,71	17,3	0,83	0,69	18,3	2082	26	162	59
23	0,02	25000	12	1	13	0,84	0,66	28,7	0,81	0,64	28,8	2078	30	153	68
24	0,02	10000	12	1	14	0,84	0,64	24,9	0,80	0,63	24,4	2095	13	179	42
25	0,05	15000	12	1	8	0,84	0,67	21,3	0,83	0,67	21,2	2091	17	171	50
26	0,05	20000	12	1	9	0,84	0,67	24,2	0,83	0,66	23,6	2084	24	158	63
27	0,01	25000	12	1	10	0,85	0,72	18,1	0,84	0,71	17,5	2075	33	149	72
28	0,01	30000	12	1	9	0,82	0,62	30,4	0,79	0,60	30,4	2085	23	166	55
29	0,01	20000	12	1	9	0,86	0,73	19,1	0,84	0,72	19,2	2084	24	151	70
30	0,01	25000	12	1	9	0,83	0,68	44,8	0,81	0,66	46,4	2020	88	107	114
31	0,05	10000	12	1	10	0,85	0,66	26,8	0,83	0,65	27,6	2088	20	158	63
32	0,02	15000	12	1	10	0,85	0,68	22,3	0,82	0,65	23,9	2083	25	161	60
33	0,03	25000	12	1	8	0,83	0,61	29,0	0,78	0,59	30,2	2096	12	188	33
34	0,05	20000	12	1	10	0,86	0,76	15,3	0,85	0,74	16,0	2075	33	150	71
35	0,05	20000	12	1	12	0,86	0,70	17,2	0,81	0,67	18,9	2083	25	160	61
36	0,07	20000	12	1	12	0,85	0,69	21,3	0,82	0,64	24,2	2093	15	169	52
37	0,01	10000	12	1	13	0,84	0,71	23,8	0,80	0,67	26,7	2080	28	154	67
38	0,01	20000	12	1	13	0,83	0,67	21,2	0,79	0,65	22,6	2080	28	162	59
39	0,05	25000	12	1	13	0,85	0,71	22,2	0,81	0,66	25,3	2087	21	156	65
40	0,01	10000	12	1	14	0,85	0,66	28,7	0,81	0,64	29,8	2094	14	173	48
41	0,01	20000	12	1	14	0,86	0,72	18,2	0,83	0,71	17,6	2088	20	159	62

continua

Tabela 8 – Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 1 hora e dados do INMET

continuação

Rede Neural						Correlação						Contingência			
Teste	ETA	NTMAX	NVAR1	NVAR2	NH	aprendizado			teste			NN	NS	SN	SS
						R	a	b	Rt	at	bt				
42	0,02	10000	12	1	12	0,85	0,71	24,6	0,84	0,69	25,5	2069	39	142	79
43	0,02	20000	12	1	12	0,84	0,66	25,6	0,80	0,64	26,8	2080	28	156	65
44	0,05	25000	12	1	12	0,83	0,61	33,2	0,75	0,54	37,5	2100	8	186	35
45	0,02	10000	12	1	13	0,84	0,68	27,2	0,80	0,64	29,2	2088	20	162	59
46	0,02	15000	12	1	13	0,85	0,68	31,2	0,84	0,67	31,3	2077	31	138	83
47	0,01	10000	12	1	14	0,85	0,67	22,6	0,82	0,66	22,4	2093	15	169	52
48	0,02	20000	12	1	14	0,84	0,62	26,1	0,78	0,59	28,2	2098	10	178	43
49	0,05	15000	12	1	14	0,85	0,72	24,2	0,80	0,67	27,9	2070	38	143	78
50	0,03	25000	12	1	14	0,87	0,74	15,7	0,79	0,69	18,2	2085	23	146	75
51	0,01	10000	12	1	15	0,84	0,65	32,1	0,79	0,60	35,8	2088	20	166	55
52	0,07	10000	12	1	15	0,84	0,68	27,8	0,81	0,66	29,1	2079	29	146	75
53	0,08	10000	12	1	15	0,84	0,68	21,9	0,78	0,64	24,9	2096	12	169	52
54	1,00	10000	12	1	6	0,84	0,65	26,7	0,84	0,66	25,2	2089	19	165	56
55	1,00	15000	12	1	6	0,85	0,70	21,5	0,85	0,69	21,6	2081	27	165	56
56	1,00	20000	12	1	6	0,84	0,63	28,6	0,84	0,63	28,2	2097	11	190	31
57	0,01	20000	12	1	9	0,85	0,70	22,6	0,83	0,68	23,5	2090	18	174	47
58	0,05	10000	12	1	9	0,85	0,69	21,9	0,84	0,68	21,8	2078	30	154	67
59	0,05	15000	12	1	9	0,85	0,71	19,1	0,81	0,67	21,3	2091	17	161	60
60	0,05	20000	12	1	9	0,84	0,69	22,0	0,82	0,69	21,5	2080	28	149	72
61	1,00	10000	12	1	9	0,85	0,69	23,8	0,82	0,67	25,0	2094	14	174	47
62	1,00	15000	12	1	9	0,85	0,68	22,9	0,82	0,67	23,2	2088	20	161	60
63	1,00	20000	12	1	9	0,84	0,68	21,1	0,80	0,63	24,1	2091	17	172	49
64	0,01	10000	12	1	10	0,85	0,70	21,0	0,84	0,69	20,5	2087	21	162	59
65	0,01	20000	12	1	10	0,84	0,63	31,1	0,82	0,60	33,0	2099	9	194	27
66	0,01	25000	12	1	10	0,85	0,64	22,7	0,81	0,61	24,8	2102	6	194	27
67	1,00	10000	12	1	10	0,84	0,67	24,7	0,80	0,65	25,7	2080	28	155	66
68	1,00	15000	12	1	10	0,85	0,72	19,5	0,80	0,68	21,5	2099	9	179	42
69	1,00	20000	12	1	10	0,85	0,68	24,0	0,78	0,64	25,1	2097	11	185	36
70	1,00	15000	12	1	11	0,85	0,66	24,1	0,80	0,63	25,2	2099	9	180	41
71	1,00	20000	12	1	11	0,83	0,67	23,2	0,80	0,65	23,8	2083	25	155	66
72	1,00	25000	12	1	11	0,86	0,70	19,7	0,79	0,65	23,1	2083	25	159	62
73	0,10	20000	12	1	8	0,82	0,64	28,8	0,81	0,65	27,4	2069	39	159	62
74	0,20	25000	12	1	9	0,85	0,65	22,9	0,82	0,63	24,3	2100	8	178	43
75	0,30	20000	12	1	10	0,85	0,69	23,5	0,83	0,66	25,0	2090	18	159	62
76	0,40	10000	12	1	14	0,84	0,65	26,1	0,81	0,64	26,3	2088	20	162	59
77	0,60	10000	12	1	15	0,85	0,75	14,6	0,81	0,70	16,9	2092	16	172	49
78	0,80	15000	12	1	15	0,86	0,71	19,9	0,76	0,64	24,6	2093	15	173	48
79	0,02	10000	12	1	10	0,85	0,72	16,5	0,84	0,70	16,5	2080	28	156	65
80	0,02	15000	12	1	10	0,85	0,69	21,9	0,84	0,68	22,1	2092	16	154	67
81	0,02	20000	12	1	10	0,85	0,74	15,6	0,83	0,72	15,9	2073	35	147	74
82	0,02	30000	12	1	10	0,85	0,67	22,4	0,81	0,65	23,7	2087	21	166	55
83	0,02	5000	12	1	10	0,84	0,68	22,7	0,83	0,67	22,1	2098	10	180	41

Onde:

ETA: fator de aprendizado	NN: evento não observado e não previsto
NTMAX: número de apresentações	NS: evento não observado, mas previsto
NVAR1: número de variáveis de entrada	SN: evento observado e não previsto
NVAR2: número de variáveis de saída	SS: evento observado e previsto
NH: número de neurônios na camada oculta	

Conjunto de aprendizado:	Conjunto de teste (t):
R: correlação	Rt: correlação
a: coeficiente angular	at: coeficiente angular
b: coeficiente linear	bt: coeficiente linear

O conjunto de dados foi dividido em 1.553 para aprendizado e 776 para teste.

O melhor ajuste foi obtido com os parâmetros NH=9, Eta=0,01 e NTMAX=20.000.

A Figura 49 mostra a dispersão dos valores máximos de ozônio (medidos e estimados), considerando-se todos os resultados de saída da RNA (teste + aprendizado).

Figura 49 - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 1h e dados do INMET)

A Tabela 9 apresenta, para esta simulação, a comparação entre as ultrapassagens do padrão nacional de qualidade do ar considerando os valores observados e previstos.

Tabela 9 - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 1h) e dados do INMET

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	2073	35
	SIM	137	84

Calculando-se as estatísticas de previsão, temos:

A = 93%

B = 0,54

FAR = 29%

POD = 38%

r = 0,84

O modelo apresenta alto percentual de acerto (93%). O valor do desvio (B) indica subestimação dos valores. A taxa de alarme falso (FAR) mostra que 29% das concentrações foram previstas altas, mas não ocorreram. A capacidade de prever valores altos foi de 38% e o coeficiente de correlação (0,84) foi considerado muito bom. Os pesos de cada variável de entrada estão indicados na Tabela 10. Os valores dos pesos indicam que a variável vento meridional da manhã é a mais importante do modelo.

Tabela 10 - Pesos das variáveis de entrada com dados de ozônio (padrão 1h) e dados do INMET

Variáveis de entrada		Soma dos pesos
manhã	temperatura	28,70
	umidade relativa	40,89
	vento zonal (u)	15,68
	vento meridional (v)	89,26
	pressão atmosférica	21,82
tarde	temperatura	48,40
	umidade relativa	20,14
	vento zonal (u)	64,25
	vento meridional (v)	17,07
	pressão atmosférica	19,04
	radiação	26,49
	dia da semana	5,68

4.4 MODELAGEM APLICANDO PADRÃO DO OZÔNIO DE 8 HORAS E DADOS DO INMET

Os resultados dos ajustes da rede neural, considerando-se o padrão estadual de qualidade do ar do ozônio de 8 horas ($140 \mu\text{g}/\text{m}^3$) com dados do INMET, estão na Tabela 11.

Tabela 11 – Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 8 horas e dados do INMET

Rede Neural						Correlação						Contingência			
Teste	ETA	NTMAX	NVAR1	NVAR2	NH	aprendizado			teste			NN	NS	SN	SS
1	0,01	10000	12	1	8	0,87	0,76	17,4	0,83	0,72	19,3	2179	23	80	32
2	0,01	15000	12	1	8	0,87	0,75	16,0	0,83	0,72	17,8	2178	24	80	32
3	0,05	10000	12	1	10	0,87	0,75	16,0	0,84	0,72	17,8	2180	22	76	36
4	0,07	15000	12	1	10	0,87	0,73	23,8	0,84	0,72	23,9	2180	22	79	33
5	0,03	10000	12	1	12	0,87	0,71	22,7	0,82	0,68	24,3	2189	13	84	28
6	0,05	20000	12	1	8	0,86	0,69	26,0	0,82	0,67	26,3	2193	9	90	22
7	0,09	10000	12	1	8	0,86	0,71	27,0	0,83	0,70	26,6	2171	31	75	37
8	0,09	15000	12	1	8	0,87	0,75	17,6	0,83	0,72	19,6	2178	24	79	33
9	1,00	15000	12	1	9	0,87	0,77	20,0	0,83	0,75	21,1	2162	40	67	45
10	1,00	15000	12	1	10	0,87	0,76	14,1	0,82	0,73	16,1	2179	23	75	37
11	0,04	15000	12	1	10	0,86	0,72	19,4	0,84	0,71	19,6	2183	19	84	28
12	0,07	15000	12	1	10	0,87	0,76	16,6	0,82	0,73	18,3	2172	30	78	34
13	0,07	10000	12	1	10	0,87	0,79	19,8	0,83	0,75	21,7	2169	33	72	40
14	0,07	20000	12	1	10	0,87	0,77	18,6	0,84	0,73	20,8	2169	33	71	41
15	0,07	25000	12	1	10	0,87	0,75	16,2	0,84	0,72	17,4	2181	21	84	28
16	0,05	15000	12	1	11	0,87	0,77	13,2	0,81	0,71	16,7	2177	25	83	29
17	1,00	15000	12	1	11	0,87	0,76	20,4	0,82	0,74	21,8	2177	25	75	37
18	0,01	10000	12	1	11	0,88	0,74	17,5	0,84	0,71	19,5	2188	14	79	33
19	0,05	15000	12	1	8	0,86	0,78	20,7	0,83	0,75	21,9	2169	33	72	40
20	0,07	15000	12	1	8	0,87	0,72	21,6	0,84	0,69	22,8	2184	18	82	30
21	0,01	10000	12	1	13	0,88	0,73	23,8	0,84	0,71	24,9	2187	15	85	27
22	0,08	15000	12	1	13	0,87	0,75	13,4	0,83	0,71	15,2	2184	18	86	26
23	1,00	20000	12	1	13	0,88	0,78	16,9	0,83	0,74	18,8	2183	19	73	39
24	0,03	10000	12	1	14	0,88	0,76	16,3	0,82	0,72	18,7	2187	15	83	29
25	0,05	10000	12	1	14	0,88	0,76	18,0	0,82	0,73	19,3	2174	28	79	33
26	0,02	10000	12	1	15	0,87	0,70	18,9	0,82	0,66	21,5	2189	13	85	27
27	0,07	10000	12	1	15	0,87	0,79	14,3	0,81	0,73	17,5	2180	22	72	40
28	1,00	10000	12	1	15	0,87	0,77	13,4	0,82	0,73	16,3	2177	25	77	35
29	0,05	10000	12	1	12	0,87	0,72	26,0	0,83	0,72	26,0	2190	12	91	21
30	1,00	15000	12	1	12	0,87	0,77	19,2	0,83	0,74	20,6	2183	19	79	33
31	1,00	10000	12	1	13	0,87	0,79	15,7	0,82	0,75	17,9	2171	31	70	42
32	1,00	15000	12	1	13	0,87	0,78	11,5	0,79	0,71	15,8	2181	21	80	32
33	1,00	20000	12	1	13	0,87	0,77	13,4	0,79	0,70	17,8	2178	24	81	31
34	1,00	10000	12	1	13	0,87	0,75	14,9	0,81	0,70	17,7	2183	19	87	25
35	1,00	15000	12	1	13	0,87	0,78	12,3	0,82	0,74	14,8	2177	25	77	35
36	1,00	20000	12	1	13	0,88	0,77	15,8	0,80	0,70	20,0	2180	22	78	34
37	0,50	10000	12	1	13	0,87	0,77	19,3	0,82	0,73	21,8	2173	29	66	46
38	0,50	15000	12	1	13	0,87	0,71	20,5	0,82	0,68	22,7	2184	18	86	26
39	0,50	20000	12	1	13	0,87	0,73	20,8	0,83	0,70	22,8	2186	16	86	26
40	0,80	10000	12	1	13	0,88	0,76	19,5	0,82	0,73	21,3	2175	27	72	40
41	0,80	15000	12	1	13	0,87	0,74	16,9	0,82	0,69	19,2	2188	14	83	29
42	0,80	20000	12	1	13	0,88	0,76	14,2	0,84	0,74	15,7	2186	16	78	34
43	0,01	10000	12	1	6	0,86	0,77	13,1	0,83	0,74	14,8	2175	27	82	30

continua

Tabela 11 – Resultados dos testes realizados para ajuste de redes neurais – padrão do ozônio de 8 horas e dados do INMET

continuação

Rede Neural						Correlação						Contingência			
Teste	ETA	NTMAX	NVAR1	NVAR2	NH	aprendizado			teste			NN	NS	SN	SS
						R	a	b	Rt	at	bt				
44	0,01	15000	12	1	6	0,86	0,76	14,0	0,83	0,72	16,0	2183	19	85	27
45	0,01	20000	12	1	6	0,86	0,78	19,3	0,85	0,76	20,1	2170	32	77	35
46	1,00	10000	12	1	6	0,86	0,77	19,6	0,83	0,73	21,5	2165	37	72	40
47	1,00	15000	12	1	6	0,86	0,78	18,6	0,85	0,76	19,1	2164	38	70	42
48	1,00	20000	12	1	6	0,86	0,76	24,3	0,83	0,74	25,6	2163	39	71	41
49	0,05	15000	12	1	8	0,87	0,76	16,3	0,84	0,73	17,9	2177	25	76	36
50	0,05	20000	12	1	8	0,86	0,78	17,8	0,84	0,75	19,2	2169	33	73	39
51	0,05	25000	12	1	8	0,86	0,70	24,7	0,82	0,69	24,8	2191	11	92	20
52	0,50	15000	12	1	9	0,87	0,76	15,6	0,83	0,73	17,3	2187	15	77	35
53	0,50	20000	12	1	9	0,87	0,75	17,4	0,79	0,68	21,3	2180	22	79	33
54	0,60	20000	12	1	10	0,87	0,75	17,7	0,82	0,71	20,1	2180	22	80	32
55	0,90	10000	12	1	14	0,88	0,75	13,8	0,84	0,73	14,7	2184	18	77	35
56	0,90	15000	12	1	15	0,87	0,79	18,2	0,81	0,73	21,8	2169	33	68	44
57	0,90	30000	12	1	16	0,87	0,77	22,3	0,82	0,73	24,4	2174	28	72	40
58	0,90	15000	12	1	16	0,88	0,75	16,3	0,82	0,71	18,8	2182	20	77	35
59	0,10	10000	12	1	12	0,87	0,75	14,7	0,83	0,72	16,7	2180	22	86	26
60	0,10	15000	12	1	12	0,87	0,78	16,5	0,80	0,75	18,1	2168	34	68	44
61	0,10	20000	12	1	12	0,87	0,77	14,0	0,77	0,70	17,7	2175	27	75	37
62	0,20	10000	12	1	12	0,87	0,77	16,8	0,83	0,73	18,4	2180	22	81	31
63	0,70	10000	12	1	12	0,86	0,77	18,5	0,82	0,73	20,7	2178	24	74	38
64	0,70	20000	12	1	13	0,87	0,77	13,6	0,74	0,67	19,6	2179	23	79	33
65	0,70	25000	12	1	14	0,88	0,77	13,2	0,79	0,70	17,1	2179	23	78	34
66	0,20	10000	12	1	3	0,80	0,65	39,1	0,79	0,63	39,4	2138	64	65	47
67	0,50	15000	12	1	3	0,85	0,73	18,0	0,84	0,69	19,8	2185	17	85	27
68	0,60	20000	12	1	4	0,82	0,69	32,9	0,81	0,69	32,6	2151	51	71	41
69	0,80	20000	12	1	5	0,86	0,76	14,0	0,83	0,74	15,3	2179	23	86	26
70	0,70	10000	12	1	5	0,86	0,76	19,8	0,84	0,74	21,0	2166	36	71	41
71	0,90	10000	12	1	6	0,86	0,77	20,4	0,83	0,74	22,3	2165	37	71	41
72	0,02	5000	12	1	7	0,87	0,77	16,8	0,85	0,75	17,6	2175	27	79	33
73	0,02	10000	12	1	7	0,87	0,76	16,2	0,84	0,73	17,5	2182	20	83	29
74	0,02	15000	12	1	7	0,86	0,77	15,9	0,83	0,74	17,7	2172	30	80	32
75	0,05	5000	12	1	14	0,87	0,72	14,4	0,84	0,69	16,1	2188	14	90	22
76	0,05	5000	12	1	15	0,87	0,73	20,4	0,83	0,70	21,8	2181	21	79	33
77	0,05	5000	12	1	16	0,88	0,74	16,7	0,83	0,71	19,1	2192	10	81	31
78	0,30	10000	12	1	11	0,87	0,75	15,9	0,84	0,72	17,4	2183	19	79	33
79	0,40	20000	12	1	11	0,87	0,75	19,8	0,83	0,73	21,3	2177	25	72	40
80	0,50	30000	12	1	11	0,87	0,71	25,6	0,82	0,70	26,4	2174	28	76	36
81	1,00	10000	12	1	3	0,85	0,70	22,7	0,83	0,68	24,2	2175	27	86	26
82	0,09	15000	12	1	6	0,86	0,75	21,4	0,84	0,73	21,9	2198	4	94	18
83	0,08	15000	12	1	9	0,87	0,75	17,4	0,83	0,71	20,0	2179	23	78	34
84	0,09	15000	12	1	12	0,87	0,74	19,7	0,83	0,73	20,4	2174	28	73	39
85	0,09	25000	12	1	12	0,87	0,76	12,9	0,83	0,73	14,4	2193	9	82	30
86	0,09	30000	12	1	12	0,86	0,73	23,0	0,81	0,70	25,0	2177	25	71	41

Onde:

ETA: fator de aprendizado	NN: evento não observado e não previsto
NTMAX: número de apresentações	NS: evento não observado, mas previsto
NVAR1: número de variáveis de entrada	SN: evento observado e não previsto
NVAR2: número de variáveis de saída	SS: evento observado e previsto
NH: número de neurônios na camada oculta	

Conjunto de aprendizado:	Conjunto de teste (t):
R: correlação	Rt: correlação
a: coeficiente angular	at: coeficiente angular
b: coeficiente linear	bt: coeficiente linear

O conjunto de dados foi dividido em 1.543 dados para aprendizado e 771 para teste. O melhor ajuste foi obtido com os parâmetros NH=9, Eta=1 e NTMAX=15.000.

A Figura 50 mostra a dispersão dos valores máximos de ozônio (medidos e estimados), considerando-se todos os resultados de saída da RNA (teste + aprendizado).

Figura 50 - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 8h e dados do INMET)

A Tabela 12 apresenta, para esta simulação, a comparação entre as ultrapassagens do padrão estadual de qualidade do ar considerando os valores observados e previstos.

Tabela 12 - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 8h) e dados do INMET

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	2162	40
	SIM	67	45

Calculando-se as estatísticas de previsão, temos:

A = 95%

B = 0,76

FAR = 47%

POD = 40%

r = 0,85

O modelo tem, no geral, alto percentual de acerto (95%) e 40% de capacidade de prever altas concentrações. A taxa de alarme falso (FAR) mostra que 47% da previsão de eventos altos não ocorreu. Os pesos de cada variável de entrada estão indicados na Tabela 13.

Tabela 13 - Pesos das variáveis de entrada com dados de ozônio (padrão 8h) e dados do INMET

Variáveis de entrada		Soma dos pesos
manhã	temperatura	56,93
	umidade relativa	58,92
	vento zonal (u)	19,38
	vento meridional (v)	3,02
	pressão atmosférica	10,64
tarde	temperatura	115,05
	umidade relativa	25,71
	vento zonal (u)	71,13
	vento meridional (v)	19,80
	pressão atmosférica	3,22
	radiação	43,65
	dia da semana	6,05

Neste modelo, a temperatura da tarde é a variável mais importante, e na sequência o vento zonal (u).

5. DISCUSSÃO

Embora o desempenho de um modelo de previsão tenha de ser analisado pelo conjunto de todas as estatísticas de verificação simultaneamente, as análises individuais, de modo geral, obtidas no presente estudo foram as seguintes:

- Verificando-se a Precisão das simulações, pode-se dizer que os percentuais de acertos foram muito semelhantes e bons, pois apresentaram valores acima de 90%. Podemos afirmar que o modelo está estimando muito bem os valores de concentrações de ozônio.

TONG et al. (2009) obtiveram precisão de 96%, em estudo que avaliou o desempenho do modelo CMAQ, considerando o ozônio cumulativo associado à exposição da vegetação.

No estudo de YAZDANPANA et al. (2009), que não consta no Quadro 5, foi aplicada a técnica de rede neural artificial para prever o ozônio atmosférico da cidade de Isfahan, no Iran. Foram analisadas várias redes neurais com diferentes indicadores meteorológicos. As variáveis meteorológicas consistiam em temperaturas (bulbo seco e ponto de orvalho) e altura geopotencial em níveis de 100, 50, 30, 20 e 10 hPa, velocidade e direção do vento. Estes dados, juntamente com valores de ozônio, formaram a matriz de entrada do modelo neural. O modelo foi elaborado com base em dados diários de 1997 a 2004, obtidos da estação de monitoramento de Isfahan. Com a rede neural final, os valores de ozônio foram previstos com uma estatística de precisão de 76%. Com este valor, os autores

consideraram que as concentrações de ozônio foram bem estimadas.

- Algumas simulações, neste estudo, apresentaram valores moderados de Taxa de Alarme Falso (14% e 29%), o que pode ser considerado aceitável.

Em relação à essa taxa, ZHANG et al. (2012) obtiveram melhores resultados (2,63% e 7,79%), utilizando modelo estatístico HMM-Gamma. Por outro lado, no estudo de TONG et al. (2009), com o modelo CMAQ, a taxa de alarme falso foi muito alta (82%).

- A capacidade de prever altas concentrações, indicada pela Probabilidade de Detecção, mostrou que os melhores resultados foram os modelos simulados com dados do INMET (38% e 40%). Ou seja, a forma como são gerados os dados meteorológicos tem grande influência nos resultados.

- Quanto aos pesos das variáveis de entrada, as simulações mostraram que as variáveis temperatura e vento meridional foram as mais importantes nos modelos, neste estudo.

A variável meteorológica temperatura também foi considerada uma das mais importantes na formação de ozônio, em outros estudos (HRUST et al., 2009; TIE et al., 2009; GUPTA e MOHAN, 2015; CARRERAS-SOSPEDRA et al., 2006; GARNER e THOMPSON, 2013; MELKONYAN et al., 2013).

Esta variável também foi estudada por STATHOPOULOU et al. (2008) que verificou sua influência nos níveis de concentração do ozônio troposférico na área urbana de Atenas, Grécia. A cidade de Atenas é

caracterizada por um forte efeito de ilha de calor causado, principalmente, por acelerada industrialização e urbanização. Dados de temperatura de 23 estações experimentais da região metropolitana e concentração de ozônio de 3 estações, para um período de dois anos (1996 e 1997), foram analisados através de correlação linear e variação temporal. Além disso, a pesquisa foi enriquecida com um modelo de rede neural para estudar uma abordagem mais quantitativa da influência da temperatura sobre os valores de concentração de ozônio. Os resultados mostraram que a temperatura foi um parâmetro predominante, afetando consideravelmente os valores de concentração de ozônio.

A importância da variável vento da manhã, no modelo, pode estar relacionada à hipótese de que as condições de dispersão dos precursores de ozônio são importantes na formação do poluente no período da tarde.

O campo vento (zonal e meridional) também foi indicado como o mais importante no modelo de redes neurais, simulado por BORGES et al. (2012).

Estudos também apontaram a importância das concentrações de NO e NO₂, como dados de entrada do modelo, juntamente com os meteorológicos. Os resultados indicaram melhora da previsão das concentrações de ozônio (GÓMEZ-SANCHIS et al., 2006; RAHMAN et al., 2012).

Outro exemplo de estudo da influência do NO e NO₂ na formação de ozônio foi realizado por GUARDANI et al. (2003). Eles analisaram o comportamento do ozônio em diferentes regiões da RMSP, com ênfase em concentrações de poluentes e variáveis meteorológicas abrangendo locais

com características diferentes de tráfego e atividades econômicas. A aplicação combinada de análise de componentes principais com técnicas de agrupamento, para dados entre 1997 e 2000, possibilitou a identificação de relações implícitas entre variáveis associadas com processos de formação de ozônio em diferentes locais. Assim, as estações de monitoramento da qualidade do ar localizadas próximas de área de tráfego intenso foram afetadas, principalmente, por emissões de gases poluentes de veículos tendendo a apresentar baixas concentrações de ozônio. Outras estações de monitoramento, distribuídas em toda a área urbana, localizadas distantes de vias de tráfego intenso tiveram tendência a apresentar maior valor de concentração de ozônio e seu comportamento foi influenciado, principalmente, pelas condições meteorológicas. Embora a componente principal estivesse relacionada às condições meteorológicas, a composição dos coeficientes de componentes indicou maior influência dos precursores de ozônio, como NO e NO₂. Especificamente para a RMSP, estes resultados foram importantes nos estudos de planejamento da distribuição geográfica das estações de medição da qualidade do ar da CETESB.

A variável cobertura de nuvem teve pouca influência no modelo, possivelmente em decorrência da utilização de técnica menos precisa na sua determinação, pois trata-se de medida observacional.

Como a formação de ozônio é influenciada pelas condições da temperatura, vento, radiação e concentrações de seus precursores, era esperado que a variável radiação apresentasse peso maior no modelo.

As demais variáveis meteorológicas apresentaram importância

relativamente similar.

Apesar de a variável dia da semana ter apresentado pouca importância, sua introdução talvez tenha contribuído para melhoria do ajuste do modelo. BORGES et al. (2012) também indicaram esta variável como a de menor influência no modelo.

- Os valores de Desvio, neste estudo, ficaram todos abaixo de 1, apontando subestimação dos valores de ozônio estimados, o que é indicativo da necessidade de melhoria do modelo.

Na revisão sistematizada verificou-se que houve um equilíbrio entre o número de estudos que superestimaram e os que subestimaram os valores previstos de ozônio. Os estudos com modelo WRF/Chem tenderam a superestimar, enquanto os estudos com modelo CALGRID subestimaram os valores. No geral, na área urbana houve superestimação e na área rural subestimação dos valores de concentração de ozônio.

Os resultados dos coeficientes de correlação, neste estudo, foram de alto a muito alto, indicando que os valores estimados de ozônio estavam muito bem correlacionados com os observados. No geral, os modelos simulados com os dados das variáveis meteorológicas do INMET apresentaram melhores resultados que os do CPTEC, tanto para o ozônio-1h, quanto para o ozônio-8h, sendo o de 8 horas de melhor previsibilidade. Isto é indicativo de que, quanto mais os valores das variáveis meteorológicas previstos estiverem próximos dos valores medidos, melhores serão os valores simulados de ozônio. Ou seja, os valores de previsão dos parâmetros meteorológicos, principalmente os de temperatura, estão

relacionados diretamente aos valores previstos do ozônio, neste modelo.

Os valores de coeficiente de correlação, indicados na revisão sistematizada, foram: 0,59 (EDER et al., 2006), 0,70 (EDER et al., 2009), acima de 0,60 (WANG et al., 2011), entre 0,50 e 0,80 (CHEMEL et al., 2010), 0,84 (HRUST et al., 2009), 0,82 e 0,88 (BORGES et al., 2012). Os melhores resultados foram obtidos pelos modelos de RNAs.

Com a aplicação da técnica de redes neurais, outros autores também encontraram bons resultados dos valores de correlação. OZDEMIR et al. (2008) realizaram estudo para prever níveis de concentração de ozônio na Turquia, com as seguintes variáveis meteorológicas: umidade relativa do ar, temperatura, nebulosidade, pressão, direção e velocidade do vento, chuva e alguns parâmetros de poluentes que têm efeito sobre a formação de ozônio, como NO e NO₂, do ano de 2003. Os dados meteorológicos foram obtidos a partir da estação meteorológica Turkish (lado da Anatólia) e estação Florya (lado europeu). A poluição do ar é um grande problema nos países em desenvolvimento, como a Turquia. Estes países ainda dependem de carvão para fornecer energia para suas usinas. Nos últimos 10 anos, tem havido uma melhora significativa na qualidade do ar, especialmente em Istambul, que é o maior centro urbano da Turquia, devido a uma substituição de carvão para o gás natural de uso industrial e residencial. Os resultados mostraram melhor desempenho do modelo para o lado da Anatólia, quando foi adotado o número de neurônios igual a 24. O coeficiente de correlação foi de 0,8594, comparando-se os valores medidos e os previstos. No lado europeu, o desempenho do modelo alcançou bom resultado, apresentando

uma correlação de 0,8226.

Também aplicando redes neurais, GUARDANI et al. (1999) analisaram o ozônio troposférico em diferentes locais da RMSP. Foi treinada uma rede com as seguintes variáveis: CO, NO, NO₂, SO₂, CH₄, NMHC (hidrocarbonetos exceto metano), temperatura, velocidade e direção do vento e radiação solar, do período de junho a dezembro de 1996. Os resultados indicaram correlações altas (entre 0,93 e 0,95), comparando-se os valores observados e os previstos pela rede neural, indicando que o uso deste modelo pode ser uma valiosa ferramenta para estudar a tendência dos níveis de ozônio, sob diferentes cenários de composição do ar e condições meteorológicas.

Em outro estudo com aplicação de redes neurais, SABRI e TAREK (2012), desenvolveram um modelo global de previsão da qualidade do ar baseado na combinação de cinco poluentes diferentes: O₃, MP₁₀, SO₂, NO_x e CO_x. A concentração de poluente prevista foi obtida a partir de uma função de base radial (RBF) para a região de Annaba, nordeste da Argélia. Dada a medição da concentração de poluentes do ar e três parâmetros meteorológicos (velocidade do vento, temperatura e umidade relativa) no tempo t , os modelos poderiam prever as concentrações de poluentes atmosféricos em $t+12$ horas. O período analisado foi de 2 anos (2003 e 2004). Uma vez obtidas as concentrações, um modelo de rede neural artificial foi usado para prever a qualidade do ar através de uma escala que variava de 1 para muito boa a 5 para muito ruim. Os resultados indicaram que o modelo foi considerado promissor para a previsão da qualidade do ar.

Outros estudos de previsão de ozônio também encontraram bons resultados de coeficientes de correlação, mesmo utilizando metodologias diferentes. Assim, SILVA JR e ANDRADE (2013) analisaram a eficiência do modelo matemático WRF/Chem, na simulação dos poluentes fotoquímicos para a RMSP, com base nas concentrações de monóxido de carbono e ozônio. O modelo foi testado para situações de valores máximos e mínimos das variáveis, alternando-se dias de baixas e altas concentrações dos poluentes. O período da simulação foi de 28/10 a 01/11/2006 e para a estimativa das emissões foi utilizado o inventário feito pela CETESB, em 2006. Algumas das propostas foram de gerar aproximações para tornar as emissões mais representativas, em termos de distribuição espacial e temporal. Os resultados indicaram que as aproximações melhoraram a previsão das concentrações dos dois poluentes em cerca de 25%, apontando coeficientes de correlação de 0,79 para ozônio e 0,49 para monóxido de carbono, comparando-se os dados simulados com os medidos.

Alguns estudos também compararam as redes neurais com outras técnicas de previsão podendo auxiliar o pesquisador, no momento da escolha de metodologia.

Por exemplo, KAO e HUANG (2000) utilizaram técnicas de séries temporais e um modelo de rede neural para simular previsões de poluentes (dióxido de enxofre e ozônio), em Taiwan. Os dados foram coletados de três estações de monitoramento, entre 1993 e 1994. O modelo auto-regressivo integrado de média móvel (ARIMA), proposto por Box e Jenkins, determinou valores simulados de uma medida combinada de dados históricos com

variação temporal. Vários métodos de aprendizagem e unidades de processamento da camada oculta do modelo de rede neural foram testados. Os resultados obtidos a partir da série histórica e das redes neurais foram discutidos e comparados com base no seu desempenho de previsão. Concluiu-se que a previsão de um modelo de rede neural pode ser tão boa ou superior à de um modelo ARIMA. Alguns resultados da rede neural, no entanto, mostraram-se inadequados devido a não-linearidade no processo de busca de otimização para determinar os pesos de elos da rede.

Em outro estudo realizado na Tailândia, foram utilizadas duas técnicas para prever o ozônio: análise discriminante e redes neurais. O período do estudo foi de 2006 a 2010. O resultado da comparação de desempenho indicou que o modelo de rede neural foi superior, na média, ao modelo de análise discriminante, na previsão de ozônio (SAITHANU e MEKPARYUP, 2013).

Por outro lado, HOSHYARIPOUR et al. (2016) aplicaram dois modelos para prever o ozônio, na RMSP, em agosto de 2012: WRF/Chem (determinístico) e redes neurais (estatístico). Foram discutidos diversos pontos favoráveis e desfavoráveis dos modelos. A rede neural pareceu ser uma ferramenta adequada para prever concentrações médias de ozônio em locais específicos, com uma carga computacional menor. No entanto, para prever picos de ozônio e ter uma visão mais detalhada da distribuição temporal, bem como os impactos de diferentes fontes de emissão e mecanismos químicos sobre as concentrações de ozônio, o modelo WRF/Chem seria a melhor escolha. Concluiu-se, então, que os modelos

determinísticos como o WRF/Chem seriam ferramentas mais adequadas para apoiar o processo de tomada de decisão, já que este requer não apenas alta precisão de previsão, mas também análises de impacto/sensibilidade. Estas análises geralmente são conduzidas para determinar o efeito de diferentes fontes de emissão ou cenários da qualidade do ar. As simulações realizadas no estudo apontaram que as técnicas de redes neurais apresentaram bons resultados de previsão de ozônio, na RMSP, utilizando dados do INMET. Estas simulações, além de utilizar somente variáveis meteorológicas, não apresentaram dificuldade na obtenção dos dados e tiveram carga computacional relativamente acessível, em termos de operação e aplicabilidade. Mostraram, também, que mesmo sem a utilização da química atmosférica que é, de certo modo, mais complexa de ser validada após a implantação do modelo, os resultados apresentados foram muito bons.

Em relação à aplicabilidade de um sistema de previsão de ozônio, a CETESB utiliza um modelo desenvolvido em redes neurais, para a RMSP, somente para o padrão do ozônio de 1 hora. Portanto, o presente estudo poderá apoiar as atividades relacionadas à qualidade do ar, com a inclusão do modelo simulando para o padrão do ozônio de 8 horas.

Embora o uso da técnica de redes neurais para prever as concentrações de ozônio não seja unanimidade entre os diversos estudos já realizados, seus resultados indicam que sua capacidade de previsibilidade é muito boa e que tem muito a acrescentar e auxiliar na busca de uma melhor qualidade do ar na RMSP.

6. CONCLUSÕES

As simulações realizadas com o poluente ozônio troposférico, na RMSP, através da técnica de redes neurais artificiais permitiram concluir que:

- Os modelos simulados com os dados meteorológicos medidos pelo INMET apresentaram melhores resultados do que os simulados com os dados modelados pelo CPTEC, tanto para o ozônio padrão de 1 hora, quanto para o ozônio padrão de 8 horas.

- Os valores de concentração de ozônio observados e estimados foram muito bem correlacionados, apresentando coeficientes de correlação de alto a muito alto.

- O modelo simulado com os dados meteorológicos do INMET, considerando o padrão do ozônio de 8 horas, apresentou melhor previsibilidade.

- Os resultados encontrados mostraram-se coerentes em relação aos estudos constantes da literatura.

- Os modelos ajustados por redes neurais artificiais mostraram-se como boas alternativas de instrumentos de previsão da concentração do ozônio padrão de 8 horas, na RMSP, que serão importantes na tomada de decisões visando minimizar as consequências do poluente na saúde da população.

7. BIBLIOGRAFIA

ALMEIDA, F. C., PASSARI, A. F. L. Previsão de vendas no varejo por meio de redes neurais. **R. Adm.**, v. 41, n.3, p. 257-272, 2006.

ÁLVARES JR, O. M., LACAVA, C. I. V., FERNANDES, P. S. **Emissões Atmosféricas**. Brasília: SENAI/DN, 2002. 373p.

ALVIM, D. S., GATTI, L. V., SANTOS, M. H., YAMAZAKI, A. Estudos dos compostos orgânicos voláteis precursores de ozônio na cidade de São Paulo. *Eng. Sanit. Ambient.*, v. 16, n. 2, p. 189-196, abr-jun. 2011.

APPEL, K. W. et al. Evaluation of the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model version 4.5: Sensitivities impacting model performance Part I - Ozone. **Atmospheric Environment**, v. 41, p. 9603-9615, 2007.

BAIRD, C. **Química Ambiental**. Porto Alegre: Artmed Bookman, 2002.

BARBETTA, P. A., **Estatística aplicada às ciências sociais**. Florianópolis: Ed. da UFSC, 2002. 340p.

BELL, M. L. Climate Change, ambient ozone, and health in 50 US cities. **Climatic Change**, v. 82, p. 61-76, 2007.

BISQUERRA, R., et al. **Introdução à Estatística: enfoque informático com o pacote estatístico SPSS**. Porto Alegre: Artmed, 2004.

BOIAN, C., ANDRADE, M. F. Characterization of ozone transport among metropolitan regions. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.27, n.2, p.229-242, 2012.

BORGES, A. S. **Previsibilidade do ozônio troposférico pela técnica de rede neural artificial: estudo comparativo para a região metropolitana de São Paulo**. 2008. Tese (Doutorado em Ciências Atmosféricas) – Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo, São Paulo.

BORGES, A. S., ANDRADE, M. de F., GUARDANI, R. Ground-level prediction using a neural network model based meteorological variables and applied to the metropolitan area of São Paulo. **International Journal of Environment and Pollution**. v. 49, p. 1-15, 2012.

BRAGA, A. de P., CARVALHO, A. P. de L. F., LUDERMIR, T. B. **Redes Neurais Artificiais – teoria e aplicações**. LTC, 2007.

BRASIL. Resolução nº 003, de 28 de junho de 1990. Estabelece os padrões primários e secundários de qualidade do ar e ainda os critérios para episódios agudos de poluição do ar. **Diário Oficial da União**, Brasília, DF, 22 ago. 1990. p. 15937-39.

BREIMAN, L., FRIEDMAN, J. H., OLSHEN, R. A., STONE, C. J. **Classification and regression trees**. California: Wadsworth International Group, 1984. 358 p.

BRESSAN, A. B. Tomada de decisão em futuros agropecuários com modelos de previsão de séries temporais. **RAE-eletrônica**, v. 3, n. 1, art. 9, 2004.

BUSS, P. M., PELLEGRINI FILHO, A. A saúde e seus determinantes sociais. **PHYSIS: Revista Saúde Coletiva**, Rio de Janeiro, v. 17 (1), p. 77-93, 2007.

BYUN, D. W. et al. Evaluation of air quality models for the simulation of a high ozone episode in the Houston metropolitan area. **Atmospheric Environment**, v. 41, p. 837-853, 2007.

CAKMAK, S., DALES, R. E., VIDAL, C. B. Air pollution and mortality in Chile: susceptibility among the Elderly. **Environmental Health Perspectives**. 2007, 115:524-27.

CAMALIER, L., COX, W., DOLWICK, P. The effects of meteorology on ozone in urban areas and their use in assessing ozone trends. **Atmospheric Environment**, v. 41, p. 7127:37, 2007.

CAMILO, C. O., SILVA, J. C. **Mineração de dados: conceitos, tarefas, métodos e ferramentas**: relatório técnico. Instituto de Informática, UFG, 2009. Disponível em http://www.inf.ufg.br/sites/default/files/uploads/relatorios-tecnicos/RT-INF_001-09.pdf. Acesso em out. 2015.

CANGERANA-PEREIRA, F. A., ASSUNÇÃO, J. V., SALDIVA, P. H. N., PEREIRA, L. A. A., MIRRA, A. P., BRAGA, A. L. F. Influence of air pollution on the incidence of respiratory tract neoplasm. **Journal of the Air and Waste Management Association**. v. 55, p. 83-87, 2005.

CARRERAS-SOSPEDRA, M. et al. Air Quality Modeling in the South Coast Air Basin of California: What Do the Numbers Really Mean? **Journal of the Air & Waste Management Association**, v. 56, p. 1184-1195, 2006.

CARTER, W. P. L. **Development of the SAPRC-07 chemical mechanism and updated ozone reactivity scales**. 2010. Disponível em: <http://www.cert.ucr.edu/~carter/SAPRC/saprc07.pdf>. Acesso em: mar. 2014.

CARVALHO, V. S. B., FREITAS, E. D., MAZZOLI, C. R., ANDRADE, M. F. Avaliação da influência de condições meteorológicas na ocorrência e manutenção de um episódio prolongado com altas concentrações de ozônio sobre a Região Metropolitana de São Paulo. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v. 27, n. 4, p. 463-74, 2012.

CARVALHO, V. S. B., FREITAS, E. D., MARTINS, L. D., MARTINS, J. A., MAZZOLI, C. R., ANDRADE, M. F. Air quality status and trends over the Metropolitan Area of São Paulo, Brazil as a result of emission control policies. **Environmental Science & Policy**, v. 47, p. 68-79, 2015.

CEH – Centre for Ecology and Hydrology. **ICP Vegetation Annual Report 2014/2015**. United Kingdom: ICP Vegetation - International Cooperative Programme on Effects of Air Pollution on Natural Vegetation and Crops, 2015. Disponível em: <http://icpvegetation.ceh.ac.uk/publications/documents/FinalICPVegetationannualreport2014-15.pdf>. Acesso em set. 2015.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Estudo do comportamento do ozônio na Região Metropolitana de São Paulo**: relatório técnico. São Paulo: CETESB, 2000.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Estudo investigativo da ocorrência de ozônio troposférico por meio de biomonitoramento, no município de Rio Grande da Serra**. relatório técnico. São Paulo: CETESB, 2009.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade do Ar no Estado de São Paulo 2008**: relatório técnico. São Paulo: CETESB, 2009.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade do Ar no Estado de São Paulo 2009**: relatório técnico. São Paulo: CETESB, 2010.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade do Ar no Estado de São Paulo 2010**: relatório técnico. São Paulo: CETESB, 2011.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade do Ar no Estado de São Paulo 2011**: relatório técnico. São Paulo: CETESB, 2012.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade do Ar no Estado de São Paulo 2012**: relatório técnico. São Paulo: CETESB, 2013.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade do Ar no Estado de São Paulo 2013**: relatório técnico. São Paulo: CETESB, 2014.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade do Ar no Estado de São Paulo 2014**: relatório técnico. São Paulo: CETESB, 2015.

CHEMEL, C. et al. Evaluation of a CMAQ simulation at high resolution over the UK for the calendar year 2003. **Atmospheric Environment**, v. 44, p. 2927-2939, 2010.

CHO, S. et al. Emission sources sensitivity study for ground-level ozone and PM_{2.5} due to oil sands development using air quality modeling system: Part I-model evaluation for current year base case simulation. **Atmospheric Environment**, v. 55, p. 533-541, 2012.

CHOI, M., CURRIERO, F., JOHANTGEN, M., MILLS, M. E. C., SATTLER, B., LIPSCOMB, J. Association between ozone and emergency visits: an ecological study. **International Journal of Environmental Health Research**, v. 21, n. 3, p. 201-21, 2011.

CHUANG, M. et al. Application of WRF/Chem-MADRID for real-time air quality forecasting over the Southeastern United States. **Atmospheric Environment**, v. 45, p. 6241-6250, 2011.

CORREA, W., L. R., PORTUGAL, M. S. Previsão de séries de tempo na presença de mudança estrutural: redes neurais artificiais e modelos estruturais. **Revista Economia Aplicada**, v. 2, n. 3, p. 487-514, 1998.

CUENCA, A. M. B. et al. **Guia de Apresentação de Teses**. São Paulo: A Biblioteca, 2006. 109 p.

CUNHA, S. E. **Estatística descritiva na psicologia e na educação**. Rio de Janeiro: Forense, 1978. 245 p.

D'AMATO G., LICCARD G., D'AMATO M., CAZZOLA M. Outdoor air pollution, climatic changes and allergic bronchial asthma. **Eur. Respir. Journal**, v. 20, p. 763-76, 2002.

DAWSON, J. P. et al. Simulating present-day and future air quality as climate changes: Model evaluation. **Atmospheric Environment**, v. 42, p. 4511-4566, 2008.

DEMO, P. **Introdução Metodologia da Ciência**. São Paulo: Atlas, 1983.

DOMINICI, F. et al. On the use of generalized additive models in time-series studies of air pollution and health. **American Journal of Epidemiology**, v. 156, p. 193-203, 2002.

DRUCK, S., CARVALHO, M. S., Câmara G., Monteiro, A.V.M. **Análise Espacial de Dados Geográficos**. Brasília, EMBRAPA, 2004.

EBI, K. L., Mc GREGOR, G. Climate change, tropospheric ozone and particulate matter and health impacts. **Environmental Health Perspectives**, v. 116, p. 1449-55, 2008.

EDER, B. et al. An operational evaluation of the Eta-CMAQ air quality forecast model. **Atmospheric Environment**, v. 40, p. 4894-4905, 2006.

EDER, B. et al. A performance evaluation of the National Air Quality Forecast Capability for the summer of 2007. **Atmospheric Environment**, v. 43, p. 2312-2320, 2009.

EMPLASA – Empresa Paulista de Planejamento Paulistano. **Indicadores**. Disponível em: <http://www.emplasa.sp.gov.br/Emplasa/Indicadores/gsp.asp>. Acesso em ago. 2015.

FILLEUL, L. et al. The relation between temperature, ozone and mortality in nine French cities during the heat wave of 2003. **Environmental Health Perspectives**, v. 144, n. 9, p. 1344-47, 2006.

FINLAYSON-PITTS, B. J., PITTS JR, J. N. **Atmospheric Chemistry: Fundamentals and Experimental Techniques**. New York: John Wiley, 1986.

GARNER, G. G., THOMPSON, A. M. Ensemble statistical post-processing of the National Air Quality Forecast Capability: Enhancing ozone forecasts in Baltimore, Maryland. **Atmospheric Environment**, v. 81, p. 517-522, 2013.

GASS K. et al. Classification and regression trees for epidemiologic research: an air pollution example. **Environmental Health**, p. 13:17, 2014.

GOB, S. et al. Modeling the kinetics of a photochemical water treatment process by means of artificial neural networks. **Chemical Engineering and Processing**, v. 38, p. 373-382, 1999.

GÓMEZ-SANCHIS, J. et al. Neural networks for analysing the relevance of input variables in the prediction of tropospheric ozone concentration. **Atmospheric Environment**, v. 40, p. 6173-6180, 2006.

GOUVEIA N., FLETCHER T. Respiratory diseases in children and outdoor air pollution in São Paulo, Brazil: a time series analysis. **Occup. Environ. Med.** v. 57, p. 477-83, 2000.

GUARDANI, R., NASCIMENTO, C. A. O., GUARDANI, M. L. G., MARTINS, M. H. R. B., ROMANO, J. Study of atmospheric ozone formation by means of a neural network-based model. **Journal of the Air and Waste Management Association.** v. 49, n. 3, p. 316-23, 1999.

GUARDANI, R., AGUIAR, J. L., NASCIMENTO, C. A. O., LACAVA, C. I. V., YANAGI, Y. Ground-level ozone mapping in large urban areas using multivariate statistical analysis: application to the São Paulo Metropolitan Area. **Journal of the Air and Waste Management Association**, v. 53, p. 553-9, 2003.

GUARDANI, R., NASCIMENTO, C. A. O. Neural network-based study for predicting ground-level ozone concentration in large urban areas, applied to the São Paulo Metropolitan Area. **International Journal of Environment and Pollution**, v. 22, p. 441-59, 2004.

GUPTA, M., MOHAN, M. Validation of WRF/Chem model and sensitivity of chemical mechanisms to ozone simulation over megacity. **Atmospheric Environment**, v. 122, p. 220-229, 2015.

HANSEN, C. et al. The effect of ambient air pollution on sperm quality. **Environmental Health Perspectives**, v. 118, n. 2, p. 203-209, 2010.

HAYKIN, S. **Neural networks and learning machines**. Prentice Hall, 1999, 906 p.

HEMMINGSEN, J. G. et al. Prenatal exposure to diesel exhaust particles and effect on the male reproductive system in mice. **Toxicology**, v. 264, p. 61-68, 2009.

HOFFMANN, R., VIEIRA, S. **Análise de Regressão: uma introdução à econometria**. Editora Hucitec, 1977, 339 p.

HOSHYARIPOUR, G., BRASSEUR, G., ANDRADE, M. F., GAVIDIA-CALDERÓN, M., BOUARAR, I., YNOUE, R. Y. Prediction of ground-level ozone concentration in São Paulo, Brazil: Deterministic versus statistic models. **Atmospheric Environment**, v. 145, p. 365-375, 2016.

HRUST, L. et al. Neural network forecasting of air pollutants hourly concentrations using optimised temporal averages of meteorological variables and pollutant concentrations. **Atmospheric Environment**, v. 43, p. 5588-5596, 2009.

IBAMA - Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis. Portaria normativa nº 348, de 14 de março de 1990. Dispõe sobre a necessidade de ampliar o número de poluentes atmosféricos passíveis de monitoramento e controle no País. **Diário Oficial da União**, Brasília, DF, 14 maio 1990.

IBGE – Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. **Estimativas da população dos municípios brasileiros com data de referência em 1º de julho de 2014.** Disponível em: http://www.ibge.gov.br/home/presidencia/noticias/pdf/analise_estimativas_2014.pdf. Acesso em abr. 2015.

IBOPE – Instituto Brasileiro de Opinião Pública e Estatística. 9ª Pesquisa sobre Mobilidade Urbana – Semana da mobilidade 2015. Disponível em: <http://www.nossasaopaulo.org.br/pesquisas/mobilidadeurbana2015.pdf>. Acesso em set. 2015.

IRWIN, J. S. et al. A procedure for inter-comparing the skill of regional-scale air quality model simulations of daily maximum 8-h ozone concentrations. **Atmospheric Environment**, v. 42, p. 5403-5412, 2008.

IZAWA, H. et al. Diesel exhaust particle toxicity on spermatogenesis in the mouse is aryl hydrocarbon receptor dependent. **Journal of Reproduction and Development**, v. 53, p. 1069-1078, 2007.

JOHNSON, R. A., D. W. **Applied Multivariate Statistical Analysis**. Prentice Hall: Upper Saddle River, NJ, 1999.

KAO, J. J., HUANG, S. S. Forecast using neural network versus Box-Jenkins methodology for ambient air quality monitoring data. **Journal of the Air & Waste Management Association**, v. 50, p. 219- 26, 2000.

KHATIBI, R. et al. Developing a predictive tropospheric ozone model for Tabriz. **Atmospheric Environment**, v. 68, p. 286-294, 2013.

KOVÁCS, Z. L. **Redes neurais artificiais fundamentos e aplicações**. Editora Livraria da Física, 2006, 174 p.

LIN, C. A., PEREIRA, L. A. A., NISHIOKA, D. C., CONCEIÇÃO, G. M. S., BRAGA, A. L. F., SALDIVA, P. H. N. Air pollution and neonatal deaths in São Paulo, Brazil. **Brazilian Journal of Medical and Biological Research**. 2004, 37:765-70.

LIN, S., LIU, X., LINH, L., HWANG, S. Chronic exposure to ambient ozone and asthma admissions among children. **Journal Environmental Health Perspectives**, v. 116, p.1725-30, 2008.

LIN, Y., COBOURN, W. G. Fuzzy system models combined with nonlinear regression for daily ground-level ozone predictions. **Atmospheric Environment**, v. 41, p. 3502-3513, 2007.

LIU, P. W. G. Establishment of a Box-Jenkins Multivariate Time-Series Model to Simulate Ground-Level Peak Daily One-Hour Ozone Concentrations at Ta-Liao in Taiwan. **Journal of the Air & Waste Management Association**, v. 57, p. 1078-1090, 2007.

LIU, X. H. et al. Understanding of regional air pollution over China using CMAQ, part I performance evaluation and seasonal variation. **Atmospheric Environment**, v. 44, p. 2415-2426, 2010.

LOESCH, C., SARI, S. T. **Redes neurais artificiais fundamentos e modelos**. Editora da FURB, 1995, 166 p.

LOOSE, L. H., SILVA, C. P., JACOBI, L. F., MORAES, A. B. A utilização da curva ROC para identificar fatores de risco associados à mortalidade infantil. **Revista Bras. de Estatística**, v. 75, n. 240, p. 7-25, 2014.

LUECKEN, D. J. et al. Effects of using the CB05 vs. SAPRC99 vs. CB4 chemical mechanism on model predictions: Ozone and gas-phase photochemical precursor concentrations. **Atmospheric Environment**, v. 42, p. 5805-5820, 2008.

MARTINS, L. C., LATORRE, M. R. D. O., CARDOSO, M. R. A., GONÇALVES, F. L. T., SALDIVA, P. H. N., BRAGA, A. L. F. Air pollution and emergency room visits due to pneumonia and influenza in São Paulo, Brazil. **Rev. Saúde Pública**, v. 36, p. 88-94, 2002.

MELKONYAN, A., WAGNER, P. Ozone and its projection in regard to climate change. **Atmospheric Environment**, v. 67, p. 287-295, 2013.

MMA - Ministério do Meio Ambiente. Compromisso pela qualidade do ar e saúde ambiental Disponível em http://www.mma.gov.br/estruturas/163/arquivos/compromisso2_163.pdf. Acesso em set. 2015.

MOREIRA, D., TIRABASSI, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. **Ambiente e Sociedade**. Campinas, v. VII, n. 2, jul-dez. 2004.

MOREIRA, D. M., TIRABASSI, T., MORAES, M. R. Meteorologia e Poluição Atmosférica. **Ambiente e Sociedade**. Campinas, v. XI, n. 1, p. 1-13, jan-jun. 2008.

MOURA, M., JUNGER, W. L., MENDONÇA, G. A. S., PONCE DE LEON, A. Air quality and acute respiratory disorders in children. **Rev. Saúde Pública**, v. 42, n. 3, p. 503-11, 2008.

NASCIMENTO, C. A. O., GUARDANI, R. **Neuro: Programa de ajuste de redes neurais**. Documentação. LSCP - Laboratório de Simulação e Controle de Processos, EPUSP, São Paulo, 2000.

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. **Rev. Bras. Biom.**, v. 27, n. 1, p. 37-50, 2009.

NASCIMENTO JR, C. L., YONEYAMA, T. **Inteligência artificial em controle e automação**. São Paulo: Edgard Blucher, 2002. 218 p.

NOMI, S. N., SAKUGAWA, H., TAKEDA, K., SOLCI, M. C. Formaldeído e acetaldeído atmosféricos no campus da Universidade de Hiroshima, Japão. **Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas**, v. 31, n. 1, p. 23-29, jan-jun. 2010.

ORLANDO, J. P. **Estudo dos precursores de ozônio na cidade de São Paulo através de simulação computacional**. 2008. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear – Materiais) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo.

ORLANDO, J. P., ALVIM, D. S., YAMAZAKI, A., CORRÊA, S. M., GATTI, L. V. Ozone precursors for the São Paulo Metropolitan Area. **Science of the Total Environment**, v. 408, p. 1612-1620, 2010.

OZDEMIR, H., DEMIR, G., ALTAY, G., ALBAYRAK, S., BAYAT, C. Prediction of tropospheric ozone concentration by employing artificial neural networks. **Environmental Engineering Science**, v. 25, n. 9, p. 1249-54, 2008.

PALMA NETO, L. G., NICOLETTI, M. C. **Introdução às redes neurais construtivas**. Editora UFSCAR, 2010. 192 p.

PEREIRA, E. A., CARDOSO, A. A., DASGUPTA, P. K. Gota suspensa para avaliação de aldeído total no ar interno e externo do ambiente. **Química Nova**, v. 24, n. 4, p. 443-448, 2001.

PIERCE, T. et al. Dynamic evaluation of a regional air quality model: Assessing the emissions-induced weekly ozone cycle. **Atmospheric Environment**, v. 44, p. 3583-3596, 2010.

RAHMAN, S. M. et al. Self organizing ozone model for Empty Quarter of Saudi Arabia: Group method data handling based modeling approach. **Atmospheric Environment**, v. 59, p. 398-407, 2012.

RIBEIRO, H. Saúde Pública e Meio Ambiente: evolução do conhecimento e da prática, alguns aspectos éticos. **Saúde e Sociedade**, v. 13, n. 1, p. 70-80, jan-abr 2004.

RIBEIRO, H. Patologias do ambiente urbano: desafios para a geografia da saúde. In: Lemos, A. I. G., Silveira, M. L., Arroyo, M. (org.). **Questões territoriais na América Latina**. 1 ed. Buenos Aires: Clacso, v. 1, p. 272-293, 2006.

ROCHA, C. R. M. **Estudo numérico da influência das mudanças climáticas e das emissões urbanas no ozônio troposférico da Região Metropolitana de São Paulo**. 2013. Tese (Doutorado em Ciências Atmosféricas) – Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo, São Paulo.

RUIZ-SUÁREZ, J. C., MAYORA-IBARRA, O. A., TORRES-JIMÉNEZ, J., RUIZ-SUÁREZ, L. G. Short-term ozone forecasting by artificial neural networks. **Advances in Engineering Software**, v. 23, n. 3, p. 143-49, 1995.

SABRI, G., TAREK, K. M. Combination of artificial neural network models for air quality predictions for the region of Annaba, Algeria. **International Journal of Environmental Studies**, v. 69, n. 1, p. 79-89, 2012.

SAITHANU, K., MEKPARYUP, J. Assessment and prediction of the ground level ozone concentration in the east of Thailand. **International Journal of Pure and Applied Mathematics**, v. 84, n. 2, p. 109-121, 2013.

SANTOS, A.M. et al. Usando redes neurais artificiais e regressão logística na predição da hepatite A. **Rev. Bras. Epidemiol.**, v. 8, n. 2, p. 117-126, 2005.

SANTOS, J. R. S., CELESTE, A. B. Avaliação das estratégias de modelagem guiada por dados para previsão de vazão em rio sergipano. **Revista Ambiente e Água**, v. 9, n. 3, p. 488-98, 2014.

SÃO PAULO (Estado). Decreto nº 59.113, de 23 de abril de 2013. Dispõe sobre os novos padrões de qualidade do ar. **Diário Oficial do Estado de São Paulo**. São Paulo, v. 123, n. 76, 2013.

SCHIPA, I. et al. A GIS based air quality system for the Apulia region, southern Italy. **International Journal of Environment and Pollution**, v. 47, p. 120-133, 2011.

SEINFELD, J. H. **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution**. California: John Wiley & Sons, 1986. 738 p.

SEINFELD, J. H., PANDIS, S. N. **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution**. California: John Wiley & Sons, 1998.

SILVA, I. N., SPATTI, D. H., FLAUZINO, R. A. **Redes neurais artificiais para engenharia e ciências aplicadas**. Artliber, 2010.

SILVA JR, R. S., OLIVEIRA, M. G. L., ANDRADE, M. F. Weekend/Weekday differences in concentrations of ozone, NO_x and Non-Methane Hydrocarbon in the Metropolitan Area of São Paulo. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v. 24, n. 1, p. 100-110, 2009.

SILVA JR, R. S., ANDRADE, M. F. Validação de poluentes fotoquímicos e inclusão do inventário de emissões no modelo de qualidade do ar WRF/CHEM, para a Região Metropolitana de São Paulo. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v. 28, n. 1, p. 105-121, 2013.

SIQUEIRA, L. C. G. **Estudo das emissões de compostos orgânicos persistentes (POPs) tóxicos de formação não intencional provenientes da produção de carvão vegetal no Estado de São Paulo**. São Paulo: Faculdade de Saúde Pública/USP, 2015. Relatório de pós-doutorado. Disponível em: <<http://escolasuperior.cetesb.sp.gov.br/wp-content/uploads/sites/60/2016/06/Ligia-Cristina.pdf>>. Acesso em dez. 2016.

SITCH, S., COX, P.M., COLLINS, W.J., HUNTINGFORD, C. Indirect radiative forcing of climate change through ozone effects on the land-carbon sink. **Nature**, v. 448, p. 791-94, 2007.

SLINI, T., KAPRARA, A., KARATZAS, K. PM₁₀ forecasting for Thessaloniki, Greece. **Environmental Modelling & Software**, v. 21, p. 559-65, 2006.

SPIEGEL, M. R. **Estatística**. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil, 1972. 580 p.

STATHOPOULOU, E. et al. On the impact of temperature on tropospheric ozone concentration levels in urban environments. **J. Earth Syst. Sci**, v.117, p. 227-36, 2008.

TANG, W. et al. Influence of vertical mixing uncertainties on ozone simulation in CMAQ. **Atmospheric Environment**, v. 45, p. 2898-2909, 2011.

TIE, X. et al. Measurement and modeling of O₃ variability in Shanghai, China: Application of the WRF/Chem model. **Atmospheric Environment**, v. 43, p. 4289-4302, 2009.

TONG, D. Q., MAUZERALL, D. L. Spatial variability of summertime tropospheric ozone over the continental United States: Implications of an evaluation of the CMAQ model. **Atmospheric Environment**, v. 40, p. 3041-3056, 2006.

TONG, D. Q. et al. Vegetation exposure to ozone over the continental United States: Assessment of exposure indices by the Eta-CMAQ air quality forecast model. **Atmospheric Environment**, v. 43, p. 724-733, 2009.

USEPA – United States Environmental Protection Agency. **Ozone and your health**. Disponível em: <http://www3.epa.gov/airnow/ozone-c.pdf>. Acesso em dez. 2012.

USEPA – United States Environmental Protection Agency. **Guidelines for developing an air quality (ozone and PM_{2.5}) forecasting program**. Disponível em: http://www.epa.gov/airnow/aq_forecasting_guidance-1016.pdf. Acesso em fev. 2013.

USEPA – United States Environmental Protection Agency. **Air Pollution**. Disponível em: <http://www3.epa.gov/airquality/ozonepollution/basic.html>. Acesso em dez. 2014.

USEPA – United States Environmental Protection Agency. **Ecosystems Research**. Disponível em: <http://www2.epa.gov/science-and-technology/ecosystems-science>. Acesso em jan. 2015.

VIANELLO, R. L., ALVES, A. R. **Meteorologia básica e aplicações**. Editora UFV, 2012. 460 p.

WANG, S. et al. Development of an emission processing system for the Pearl River Delta Regional air quality modeling using the SMOKE model: Methodology and evaluation. **Atmospheric Environment**, v. 45, p. 5079-5089, 2011.

WORLD HEALTH ORGANIZATION – WHO. **Air Quality Guidelines** Particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide. Disponível em <http://www.euro.who.int/en/health-topics/environment-and-health/Housing-and-health/publications/pre-2009/air-quality-guidelines.-global-update-2005.-particulate-matter,-ozone,-nitrogen-dioxide-and-sulfur-dioxide>. Acesso em mar. 2013.

WORLD HEALTH ORGANIZATION – WHO. **News Releases**. Disponível em <http://www.who.int/mediacentre/news/releases/2014/air-pollution/en/>. Acesso em dez. 2014.

WORLD HEALTH ORGANIZATION – WHO. **Ambient (outdoor) air quality and health.** Disponível em <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs313/en/>. Acesso em ago. 2015.

YAHYA, K. et al. Real-time air quality forecasting over the southeastern United States using WRF/Chem-MADRID: Multiple-year assessment and sensitivity studies. **Atmospheric Environment**, v. 92, p. 318-338, 2014.

YAZDANPANA, H., KARIMI, M., HEJAZIZADEH, Z. Forecasting of daily total atmospheric ozone in Isfahan. **Environ. Monit. Assess**, v. 157, p. 235-41, 2009.

YU, S. et al. Performance and Diagnostic Evaluation of Ozone Predictions by the Eta-Community Multiscale Air Quality Forecast System during the 2002 New England Air Quality Study. **Journal of the Air & Waste Management Association**, v. 56, p. 1459-1471, 2006.

ZHANG, H. et al. Prediction of ozone levels using a Hidden Markov Model (HMM) with Gamma distribution. **Atmospheric Environment**, v. 62, p. 64-73, 2012.

ZHANG, Y. et al. A comprehensive performance evaluation of MM5-CMAQ for the Summer 1999 Southern Oxidants Study episode - Part II: Gas and aerosol predictions. **Atmospheric Environment**, v. 40, p. 4839-4855, 2006.

APÊNDICE

Outros resultados dos testes de ajuste da rede neural artificial

Considerando-se os parâmetros $NH=15$, $Eta=1$ e $NTMAX=15.000$:

Figura A - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 1h e dados do CPTEC)

Tabela A - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 1h) e CPTEC

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	1823	41
	SIM	170	42

$A = 89,8\%$
 $B = 0,39$
 $FAR = 49,4\%$
 $POD = 19,8\%$
 $r = 0,62$

Considerando-se os parâmetros $NH=11$, $Eta=1$ e $NTMAX=20.000$:

Figura B - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 1h e dados do CPTEC)

Tabela B - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 1h) e CPTEC

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	1844	20
	SIM	174	38

$A = 90,7\%$
 $B = 0,27$
 $FAR = 34,5\%$
 $POD = 17,9\%$
 $r = 0,68$

Considerando-se os parâmetros $NH=14$, $Eta=0,3$ e $NTMAX=35.000$:

Figura C - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 8h e dados do CPTEC)

Tabela C - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 8h) e CPTEC

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	1972	7
	SIM	86	7

$A = 95,5\%$

$B = 0,15$

$FAR = 50,0\%$

$POD = 7,5\%$

$r = 0,69$

Considerando-se os parâmetros $NH=12$, $Eta=0,8$ e $NTMAX=25.000$:

Figura D - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 8h e dados do CPTEC)

Tabela D - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 8h) e CPTEC

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	1975	4
	SIM	87	6

$A = 95,6\%$

$B = 0,11$

$FAR = 40,0\%$

$POD = 6,5\%$

$r = 0,71$

Considerando-se os parâmetros $NH=15$, $Eta=0,07$ e $NTMAX=10.000$:

Figura E - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 1h e dados do INMET)

Tabela E - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 1h) e INMET

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	2079	29
	SIM	146	75

$A = 92,5\%$
 $B = 0,47$
 $FAR = 27,9\%$
 $POD = 33,9\%$
 $r = 0,83$

Considerando-se os parâmetros $NH=10$, $Eta=0,02$ e $NTMAX=15.000$:

Figura F - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 1h e dados do INMET)

Tabela F - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 1h) e INMET

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	2092	16
	SIM	154	67

$A = 93\%$
 $B = 0,38$
 $FAR = 19\%$
 $POD = 30\%$
 $r = 0,83$

Considerando-se os parâmetros $NH=3$, $Eta=0,2$ e $NTMAX=10.000$:

Figura G - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 8h e dados do INMET)

Tabela G - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 8h) e INMET

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	2138	64
	SIM	65	47

$A = 94\%$
 $B = 0,99$
 $FAR = 58\%$
 $POD = 42\%$
 $r = 0,80$

Considerando-se os parâmetros $NH=12$, $Eta=0,1$ e $NTMAX=15.000$:

Figura H - Dispersão entre os valores observados e estimados da concentração máxima de ozônio (padrão 8h e dados do INMET)

Tabela H - Tabela de contingência com dados de ozônio (padrão 8h) e INMET

		ultrapassagens previstas	
		NÃO	SIM
ultrapassagens observadas	NÃO	2168	34
	SIM	68	44

$A = 95,6\%$

$B = 0,70$

$FAR = 43,6\%$

$POD = 39,3\%$

$r = 0,85$

CURRÍCULO LATTES

Yoshio Yanagi

Endereço para acessar este CV:

<http://lattes.cnpq.br/5565913008382146>

Última atualização do currículo em 03/11/2016

Possui Mestrado em Saúde Pública pela Faculdade de Saúde Pública da USP (FSP-USP) e graduação em Estatística pela Universidade Federal do Paraná (UFPR). Atualmente é Estatístico da Companhia Ambiental do Estado de São Paulo - CETESB. Tem experiência nas áreas de Probabilidade, Estatística Multivariada e Testes Estatísticos, atuando principalmente nos seguintes temas: análise dos poluentes atmosféricos, qualidade de dados e estatísticas de saúde. **(Texto informado pelo autor)**

CURRÍCULO LATTES

João Vicente de Assunção

Endereço para acessar este CV:

<http://lattes.cnpq.br/4890053336024335>

Última atualização do currículo em 28/09/2016

Graduado em Engenharia Industrial Modalidade Química pela Faculdade de Engenharia Industrial FEI da PUCSP(1970), graduado em Engenharia Sanitária pela Universidade de São Paulo (1977), Master of Science em Hygiene/Air Pollution - University of Pittsburgh, EUA (1974), doutorado e livre-docência em Saúde Pública/Saúde Ambiental pela Universidade de São Paulo (1993 e 2006). Professor Assistente (1987-1993), Professor Doutor (1993-2006), Professor Associado (2006-2008) e Professor Titular (2008-2014) da Universidade de São Paulo, lecionando na Faculdade de Saúde Pública e na Escola Politécnica da USP. Atualmente é Professor Colaborador Sênior da USP. Tem experiência na área da Saúde Pública e Engenharia Ambiental/Engenharia Sanitária, com ênfase em poluição do Ar, atuando principalmente nos seguintes temas: Tecnologias de controle da poluição do ar, poluentes tóxicos, monitoramento do ar, ventilação industrial e gestão ambiental. Realiza estudos e pesquisas sobre substâncias tóxicas (poluentes orgânicos persistentes - POPs, em especial dioxinas e furanos, hidrocarbonetos policíclicos aromáticos - HPA, e metais). **(Texto informado pelo autor)**