

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM SANEAMENTO,
MEIO AMBIENTE E RECURSOS HÍDRICOS

ESTIMATIVA DE CONCENTRAÇÃO DE
MATERIAL PARTICULADO EM SUSPENSÃO
NA ATMOSFERA POR MEIO DA MODELAGEM
DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Mônica Marques Caetano de Lima

Belo Horizonte

2006

**ESTIMATIVA DE CONCENTRAÇÃO DE
MATERIAL PARTICULADO EM SUSPENSÃO
NA ATMOSFERA POR MEIO DA MODELAGEM
DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS**

Mônica Marques Caetano de Lima

Mônica Marques Caetano de Lima

**ESTIMATIVA DE CONCENTRAÇÃO DE
MATERIAL PARTICULADO EM SUSPENSÃO
NA ATMOSFERA POR MEIO DA MODELAGEM
DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Saneamento, Meio Ambiente e Recursos Hídricos da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Saneamento, Meio Ambiente e Recursos Hídricos.

Área de concentração: Meio Ambiente

Linha de pesquisa: Qualidade do ar e Poluição Atmosférica

Orientador: Wilfrid Keller Schwabe

Belo Horizonte
Escola de Engenharia da UFMG

2006

Página com as assinaturas dos membros da banca examinadora, fornecida pelo Colegiado do Programa

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus familiares, aos meus amigos, aos colegas de trabalho pelo apoio dado durante a realização deste estudo.

RESUMO

Neste estudo foi estimada a concentração de material particulado em suspensão em seis diferentes bairros de Ipatinga em Minas Gerais. A ferramenta de modelagem utilizada foi a de redes neurais artificiais (ANN). Esse modelo é capaz de fazer previsões de concentração de um poluente em um determinado local devido ao seu treinamento a partir de variáveis de entrada e de saída. As variáveis de entrada utilizados foram os parâmetros meteorológicos de direção dos ventos, velocidade dos ventos (m/s), chuva (mm), temperatura ambiente (°C), calmaria (velocidades de ventos inferiores a 1 m/s) e os temporais, as estações sazonais do ano de verão e de inverno. As variáveis de saída foram os dados históricos de medição de concentração desse poluente coletados semanalmente entre os anos de 1996 a 2004. Na modelagem, foi testado o modelo tipo perceptron de multicamadas (MLP) em diversas configurações. Variaram-se a quantidade de neurônios na camada de entrada, na intermediária, na de saída e os algoritmos de treinamento. A topologia escolhida foi 13-7-6. A validação do modelo foi realizada por meio da comparação entre os valores preditos e os reais medidos nos seis pontos de monitoramento da qualidade de ar. Os resultados do modelo ANN também foram comparados com os do modelo de dispersão *industrial source complex short-term model (ISCST3)*. Foram utilizados quatro métodos de avaliação de performance da modelagem. Foram eles: erro quadrático médio (MSE), *fractional bias* (FB), índice de conformidade (IA) e o coeficiente de correlação linear (R). De uma maneira geral, os valores estimados nos bairros das Águas, Bom Retiro e Cariru foram mais próximos aos valores reais do que os obtidos nos bairros Novo Cruzeiro, Castelo e Ferroviários. A análise de comparação dos resultados entre os modelos ANN e ISCST3 mostrou que o primeiro é o que apresentou menor erro.

ABSTRACT

The aim of this study was to predict the total particulate matter concentration in the main areas of Ipatinga region. The artificial neural networks (ANN) was the modelling tool used. This model is capable of predicting the pollutant concentration just by training the input and output parameters. The input parameters were meteorological such as wind direction, wind speed, rain, ambient temperature and temporal such as, summer and winter. The output parameter used was the historical data of the total particulate matter concentration taken between 1996 and 2004. In the modelling, the multilayer perceptron (MLP) model was tested. Among the MLP configurations evaluated, the topology 13-7-6 was chosen. The validation of the model was done by comparing the simulated with the observed values. This model was also compared with the industrial source complex short-term dispersion model (ISCST3). The four statistical tools used to evaluate the fitting were medium squared error (MSE), fractional bias (FB), index of agreement (IA) and linear correlation coefficient (R). Comparing the results it was seen that the predicted values were better in das Águas, Cariru and Bom Retiro boroughs and were overestimated in Novo Cruzeiro, Castelo and Ferroviários. Besides, the predicted results of the ANN model were better than the ISCST3 dispersion model.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	OBJETIVOS	4
2.1	OBJETIVO GERAL	4
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	4
3	REVISÃO DA LITERATURA	5
3.1	MATERIAL PARTICULADO	5
3.1.1	<i>Fontes de emissão de material particulado na siderurgia</i>	5
3.1.2	<i>Material particulado na atmosfera</i>	6
3.1.3	<i>Distribuição de tamanho de partículas</i>	7
3.1.4	<i>Efeitos sobre a saúde humana</i>	10
3.1.5	<i>Efeitos na atmosfera: redução da visibilidade e chuva ácida</i>	11
3.2	MODELAGEM POR REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	12
3.2.1	<i>Histórico</i>	12
3.2.2	<i>Analogia aos Neurônios Biológicos</i>	13
3.2.3	<i>Modelos de Redes Neurais</i>	16
3.2.4	<i>Camada de neurônios de entrada</i>	18
3.2.5	<i>Camada de neurônios oculta ou intermediária</i>	18
3.2.6	<i>Camada de neurônios de saída</i>	19
3.2.7	<i>Algoritmos de aprendizagem</i>	19
3.2.8	<i>Treinamento</i>	27
3.2.9	<i>Normalização dos dados</i>	29
3.3	MODELO MATEMÁTICO ISCST3	29
3.4	ANÁLISE DE PERFORMANCE	30
4	MATERIAL E MÉTODOS	33
4.1	COLETA DE DADOS	33
4.1.1	<i>Dados de concentração de material particulado em suspensão</i>	33
4.1.2	<i>Dados meteorológicos e temporais</i>	34
4.2	MODELAGEM POR REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	35
4.2.1	<i>Camada de neurônios de entrada</i>	37
4.2.2	<i>Camada de neurônios intermediária</i>	37
4.2.3	<i>Camada de neurônios de saída</i>	38
4.2.4	<i>Algoritmos de aprendizagem</i>	39
4.2.5	<i>Treinamento</i>	39
4.2.6	<i>Análise de Performance</i>	40
4.3	MODELO MATEMÁTICO DE DISPERSÃO ISCST3	41
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	42
5.1	COLETA DE DADOS	42
5.2	MODELAGEM POR REDES NEURAIS	47
5.2.1	<i>Camada de neurônios de entrada</i>	47
5.2.2	<i>Camada de neurônios intermediária</i>	48
5.2.3	<i>Camada de neurônios de saída</i>	49
5.2.4	<i>Algoritmos de aprendizagem</i>	52
5.2.5	<i>Treinamento</i>	52
5.2.6	<i>Análise de Performance (etapa de validação)</i>	54
5.3	COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS ANN E O DE DISPERSÃO ISCST3	67
6	CONCLUSÕES	69
7	RECOMENDAÇÕES	71

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	73
ANEXOS	77
ANEXO 1	78

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 3.1 - Aerossóis típicos encontrados na atmosfera.....	7
FIGURA 3.2 - Distribuição de tamanho de partículas na atmosfera.	8
FIGURA 3.3 - Conversão do gás dióxido de enxofre em partículas de sulfato.	9
FIGURA 3.4 - Curva de penetração de partículas no sistema respiratório em função de seu tamanho.	10
FIGURA 3.5 - Estrutura de um neurônio biológico.....	13
FIGURA 3.6 - Estrutura de um neurônio artificial.....	14
FIGURA 3.7 - Aproximação de funções.....	16
FIGURA 3.8 - Grafo de uma rede MLP.....	17
FIGURA 3.9 - Aprendizagem supervisionada.....	20
FIGURA 3.10 - Esquema de propagação e retropropagação do erro.	21
FIGURA 3.11 - Validação cruzada.....	28
FIGURA 4.1 - Equipamento <i>Hi vol</i> utilizado no monitoramento de PTS em Ipatinga.	33
FIGURA 4.2 - Localização das estações de monitoramento da qualidade do ar em Ipatinga.	34
FIGURA 4.3 - Estação meteorológica.	35
FIGURA 4.4 - Etapas de desenvolvimento da modelagem por rede neural.	36
FIGURA 5.1 - Valores reais de concentração de PTS obtidos na estação do Bairro das Águas.	42
FIGURA 5.2 - Valores de concentração reais de PTS obtidos na estação do Bom Retiro.	43
FIGURA 5.3 - Valores de concentração reais de PTS na estação do Cariru.....	43
FIGURA 5.4 - Valores de concentração reais de PTS obtido na estação do Castelo.....	44
FIGURA 5.5 - Valores de concentração de PTS medidos na estação do Escritório Central.	45
FIGURA 5.6 - Valores de concentração de PTS medidos na estação do Novo Cruzeiro.....	45
FIGURA 5.7 - Frequência de direção e velocidade dos ventos entre 1996 a 2004.....	46
FIGURA 5.8 - Valores médios diários de temperatura (°C) e chuva (mm).	47
FIGURA 5.9 - Configuração do modelo 1.	50
FIGURA 5.10 - Análise de agrupamentos dos modelos de ANN obtidos em função de MSE.	51
FIGURA 5.11 - Critério de parada por validação cruzada	53
FIGURA 5.12 - Análise do erro de treinamento.....	54
FIGURA 5.13 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Cariru (CA).....	55
FIGURA 5.14 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Bairro das Águas (BA).....	55
FIGURA 5.15 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Bom Retiro (BR).	56
FIGURA 5.16 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Escritório Central (EC).....	56
FIGURA 5.17 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Novo Cruzeiro (NC).	57
FIGURA 5.18 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Castelo (CS).	57
FIGURA 5.19 - Análise do erro de validação.	58
FIGURA 5.20 - Análise de agrupamentos entre as variáveis de entrada.....	60
FIGURA 5.21 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Cariru (CA).	62

FIGURA 5.22 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Bairro das Águas (BA).	63
FIGURA 5.23 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Bom Retiro (BR).	64
FIGURA 5.24 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Escritório Central (EC).	65
FIGURA 5.25 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Novo Cruzeiro (NC).	66
FIGURA 5.26 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Castelo (CS).	67

LISTA DE TABELAS

TABELA 4.1 - Configuração da camada oculta.....	37
TABELA 4.2 - Configuração da camada de saída.....	38
TABELA 5.1 - Resultados de análise de componentes principais.	48
TABELA 5.2 - Variação da quantidade de neurônios na camada intermediária.....	48
TABELA 5.3 - Configuração dos modelos de redes MLP.....	49
TABELA 5.4 - Comparação entre os algoritmos de aprendizagem utilizados na modelagem.	52
TABELA 5.5 - Valor de erro percentual cometido na modelagem nos 6 pontos de monitoramento da qualidade do ar.....	59
TABELA 5.6 - Análise de MSE obtido nas estações de monitoramento.....	59
TABELA 5.7 - Estatística básica dos agrupamentos obtidos.	61
TABELA 5.8 - Análise estatística de comparação entre os modelos matemáticos.	68

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

ANN	- <i>Artificial neural networks</i> (Redes neurais artificiais)
b	- <i>Bias</i>
BA	- Estação de monitoramento da qualidade do ar do Bairro das Águas
BP	- Algoritmo de <i>Backpropagation</i> (retropopagação de erros)
BR	- Estação de monitoramento da qualidade do ar do bairro Bom Retiro
CA	- Estação de monitoramento da qualidade do ar do bairro Caruru
C_e	- Valor de concentração estimado pelo modelo, $\mu\text{g}/\text{m}^3$
COG	- <i>Coke oven gas</i> (Gás de coqueria)
C_r	- Valor concentração real, $\mu\text{g}/\text{m}^3$
CS	- Estação de monitoramento da qualidade do ar do bairro Castelo
\bar{C}_e, \bar{C}_r	- Valores médios de concentração em $\mu\text{g}/\text{m}^3$ estimados e reais, respectivamente
d	- Dados de saída desejados
D	- Termo de decaimento
D_a	- <i>Aerodynamic diameter</i> (Diâmetro aerodinâmico)
dp	- Desvio padrão
Δ	- Notação matemática, nabla
δ_l	- Gradiente local
E	- Direção dos ventos leste

e, e_k, e_j	- erro
$e(n)$	- vetor de erro
EC	- Estação de monitoramento da qualidade do ar do bairro Escritório Central
FB	- <i>Fractional bias</i>
$\zeta(.)$	- Corresponde à função de ativação da camada intermediária
GDX	- Algoritmo <i>Backpropagation</i> (notação utilizada no <i>software Matlab R12</i>)
<i>Hi vol</i>	- Amostrador de grandes volumes
η	- Taxa de aprendizagem utilizado na etapa de treinamento das redes neurais
IA	- <i>Index of agreement</i> (índice de conformidade)
IPM	- Partículas inaláveis
IPM	- Partículas inaláveis
ISCST3	- <i>Industrial source complex short-term model</i> (modelo de dispersão para fontes industriais complexas)
j	- Índice do nodo da camada intermediária
J	- matriz jacobiana
J^T	- transposta da matriz jacobiana
k	- Índice do nodo da camada de entrada
LM	- Algoritmo de <i>Levenberg-Marquardt</i>
LSM	- Algoritmo do mínimo quadrado médio
max	- Máximo

med	- Média
min	- Mínimo
MLP	- <i>Multi layer perceptron</i> (perceptron de multicamadas)
MSE	- <i>Mean squared error</i> (erro médio quadrático)
μ	- Termo de momento utilizado na etapa de treinamento das redes neurais
N	- Direção dos ventos norte
n	- Tamanho amostral
NC	- Estação de monitoramento da qualidade do ar do bairro Novo Cruzeiro
ne	- Representa o número de neurônios da camada de entrada
NE	- Direção dos ventos nordeste
NW	- Direção dos ventos noroeste
PAH	- Hidrocarbonetos poliaromáticos
PCA	- <i>Principal component analysis</i> (Análise de componentes principais)
pH	- Potencial hidrogeniônico
PM ₁₀	- Partículas com diâmetro aerodinâmico menor que 10 micrometros
PM _{2,5}	- Partículas com diâmetro aerodinâmico menor que 2,5 micrometros
PTS	- Partículas totais em suspensão
Q	- Representa a taxa de emissão de algum poluente atmosférico dado em g/s,
R	- <i>Linear correlation coefficient</i> (Coeficiente de correlação linear)
RPM	- Partículas respiráveis

S	- Direção dos ventos sul
SE	- Direção dos ventos sudeste
SSE	- <i>Sum of squared error</i> (Soma dos quadrados dos erros)
SW	- Direção dos ventos sudoeste
Σ	- Notação matemática de Somatório
σ_{c_e}	- Desvio padrão dos valores de concentração estimado
σ_{c_r}	- Desvio padrão dos valores de concentração real
σ_y, σ_z	- Coeficientes de dispersão utilizado no modelo de dispersão
u	- Saída do combinador linear devido aos sinais de entrada
u_s	- Velocidade do vento na altura de lançamento da fumaça, m/s
USEPA	- <i>American Environmental Protection Agency</i> (Agência americana de Proteção Ambiental)
V	- Termo vertical utilizado no modelo de dispersão
v_j	- Somatório de todos os sinais de entrada
W	- Direção dos ventos oeste
W_1, W_2, W_n	- Pesos utilizados na modelagem de redes neurais
w_{jk}, w_{ji}	- Representa os pesos
X_1, X_2, X_n	- Dados de entrada utilizados na modelagem de redes neurais
$x_i..x_n$	- Dados observados utilizados na análise de agrupamentos
Y, y_i, y_k, y_j	- Dados de saída utilizados na modelagem de redes neurais'

∂ - Notação matemática de derivada parcial

1 INTRODUÇÃO

Este estudo apresenta como tema a estimativa de concentração de material particulado em suspensão em Ipatinga, por meio da modelagem de redes neurais artificiais.

Ipatinga está localizada na região do vale do aço, interior de Minas Gerais, onde concentra-se atividade industrial voltada para o setor siderúrgico de produção de aço.

No processo siderúrgico de produção de aço, por meio das atividades de manuseio de matérias-primas como o carvão, coque, minério e queima de combustíveis oleosos, são geradas elevadas quantidades de material particulado. As emissões desse poluente são as maiores responsáveis pela contaminação do ar atmosférico de Ipatinga.

A contaminação do ar atmosférico, dependendo de sua concentração, pode alterar a qualidade do ar e, por conseguinte, ocasionar diversos transtornos, como aumento da sujeira nas zonas residenciais, chuva ácida, redução da visibilidade e afetar a saúde da população.

A redução de visibilidade é causada pela dispersão e absorção da luz solar pelas partículas presentes na atmosfera. A sua compreensão está ligada aos estudos desenvolvidos por MIE (1908).

A chuva ácida está associada principalmente à emissão para a atmosfera de partículas de nitrato e, em grau menor, devido a sulfato e cloreto originados da queima de combustíveis fósseis. Nos solos, a deposição ácida arrasta nutrientes indispensáveis ao desenvolvimento da planta. Já nos rios e lagos, a queda de pH pode provocar a mortandade de peixes. A deterioração de monumentos históricos e a corrosão de ferro-ligas são também atribuídas à chuva ácida.

A exposição da população ao ambiente poluído por material particulado pode levar a um aumento dos casos de asma, bronquite crônica, infecções do trato respiratório, doenças do coração e derrames. No corpo humano, os constituintes inorgânicos presentes nos particulados são formadores de radicais livres que afetam as atividades das células, promovendo a redução de antioxidantes e conseqüente oxidação de proteínas, entre outras. A longa exposição a partículas muito finas pode também elevar o fator de risco de mortalidade cardiopulmonar. Isso ocorre sobretudo com crianças e a população acima dos 60 anos (POPE et al. (2002)).

A contaminação do ar atmosférico pelas emissões de material particulado pode ser avaliada pela medição de sua concentração na atmosfera, comparando-se com os padrões de qualidade definidos pela legislação ambiental vigente. Existem diversas ferramentas que permitem avaliar os níveis de poluição do ar. Com o auxílio delas, o planejamento e as ações de controle das emissões desse poluente, quer seja pelo causador da poluição, quer seja pelo órgão de fiscalização tornam-se mais eficientes. Dentre as disponíveis estão os modelos matemáticos. Apresentam a vantagem, sobre as demais ferramentas, de reduzirem o custo de monitoramento (redução de análises químicas e custo com mão-de-obra). Além disso, são capazes de estimar a concentração dos poluentes em diversos locais de uma só vez.

Os modelos matemáticos já consagrados em literatura são os de dispersão ou de difusão. Estes modelos estimam a concentração dos poluentes, utilizando-se de dados estatísticos de emissão de fontes emissoras, parâmetros meteorológicos como direção, velocidade dos ventos, temperatura, entre outros e apresentam como solução uma equação matemática tipo gaussiana. MITKIEWICZ, G. (2002) desenvolveu estudo de estimativa de material particulado na região de Ipatinga, utilizando o modelo de dispersão *ISCST3*.

Recentemente, tem-se utilizado o modelo matemático de redes neurais artificiais (ANN) na resolução de problemas complexos. Esse modelo, assim como o anterior, é capaz de fazer previsões de concentração de um poluente na atmosfera. Mas utilizam um outro princípio. Geram uma função matemática baseada no ajuste dos pesos de parâmetros de entrada (variáveis explicativas), de forma que a variável de saída (variável resposta) seja mais próxima da real possível. A vantagem desse modelo sobre o de dispersão é que ele dispensa uma série de dados para avaliação dos mecanismos de transporte e princípios da termodinâmica. Supondo por exemplo que a geração de poluentes seja estável, necessitam apenas de parâmetros meteorológicos para determinar a concentração de poluentes.

Existem uma variedade de modelos de redes neurais artificiais disponíveis, utilizada nas mais diversas aplicações (classificação ou reconhecimento de padrões e aproximação de funções ou predição). Dentre essa variedade, o perceptron de multicamadas (MLP), segundo GARDNER, M.W. e DORLING, S.R. (1998) é o que mais tem sido citado em literatura científica na modelagem ambiental, sobretudo na avaliação da poluição atmosférica.

Neste contexto, este estudo busca desenvolver a modelagem em redes neurais artificiais, utilizando o modelo MLP, alimentado por apenas variáveis meteorológicas na estimativa de

Programa de Pós-graduação em Saneamento, Meio Ambiente e Recursos Hídricos da UFMG ²

concentração de material particulado em suspensão em Ipatinga. Devido ao potencial desta modelagem, espera-se a obtenção de resultados melhores do que na modelagem por dispersão.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Estimar a concentração de material particulado em suspensão, por meio da modelagem de redes neurais artificiais em Ipatinga.

2.2 Objetivos específicos

- desenvolvimento da técnica de modelagem de redes neurais artificiais para estimar a concentração de material particulado em suspensão junto aos principais pontos de monitoramento da qualidade do ar distribuídos em Ipatinga;
- determinação das principais variáveis explicativas na estimativa de material particulado em suspensão;
- investigação do comportamento da ANN criada, frente às diversas alterações nas configurações de rede propostas;
- validação do modelo de redes neurais artificiais, por meio da comparação com os resultados de medição realizados nos pontos de monitoramento da qualidade do ar;
- avaliação dos resultados alcançados pela modelagem de redes neurais, por meio da comparação com os do modelo matemático *ISCST3*.

3 REVISÃO DA LITERATURA

3.1 *Material Particulado*

O material particulado na atmosfera é produzido por diversas fontes de emissão e consiste num conglomerado de partículas de tamanhos variados, com propriedades físico-químicas diferenciadas, apresentando os mais diferentes graus de toxicidade.

3.1.1 Fontes de emissão de material particulado na siderurgia

Na indústria siderúrgica integrada a coque, o material particulado é emitido para a atmosfera em praticamente todas suas unidades de processo de produção de aço.

Na unidade de coqueificação ocorre o beneficiamento do carvão mineral para a obtenção de coque. O carvão é descarregado nos pátios de estocagem e empilhado através de equipamentos pesados. Normalmente, são estocadas quantidades além da produção para constituir reserva, em caso de interrupção no suprimento. Depois de retirado das pilhas, segue para a unidade de britagem e, após ser reduzido a uma granulometria adequada, é levado para os silos de estocagem. Os silos são dotados de mesas dosadoras que extraem a quantidade exata a ser depositada em correias transportadoras que, por sua vez, alimentam os moinhos de martelos. Novamente, o carvão é reduzido, antes de ser levado aos fornos de combustão. Os fornos de combustão de coque são constituídos de retortas de seção retangular, colocadas lado a lado e intercaladas por câmaras de aquecimento, onde é queimado o gás produzido pela própria coqueria, denominado COG (gás de coqueria). O coque produzido é levado pelo carro de carregamento até a torre de extinção e é resfriado por jatos de água sob pressão. Após resfriamento, o coque é levado à unidade de britagem e peneiramento, onde é reduzido às condições ideais para ser utilizado no alto-forno (FIGUEIREDO, D.V. (1985)).

As emissões de material particulado na coqueria são em decorrência dessas etapas de manuseio, preparo de insumos e matérias-primas e, também, das etapas de enforamento, desenforamento e extinção de coque.

Na sinterização, minério de ferro fino, finos de carvão e fundentes são aglomerados de forma adequada para o carregamento no alto-forno. A mistura é depositada em camadas sobre uma esteira formada por grelhas. Após a ignição na superfície da mistura, o ar é aspirado pelo

exaustor, fazendo com que a frente de combustão caminhe até a grelha. Com a queima são gerados gases e material particulado. O sinter formado é quebrado e resfriado, sendo transferido por correias transportadoras para a unidade de peneiramento, em que é reduzido e resfriado, sendo depois utilizado no alto-forno.

No alto-forno, o minério é convertido em ferro-gusa. A redução dos óxidos de ferro ocorre a medida que o minério, o coque e os fundentes descem em contra-corrente aos gases gerados no próprio alto-forno e ao ar quente soprado nas ventaneiras.

As emissões nas áreas de sinterização e de altos-fornos são também em decorrência das etapas de manuseio, preparo de insumos e matérias-primas.

Nas aciarias ocorre a conversão do ferro-gusa em aço. Essa conversão se faz pelo carregamento da carga sólida, do ferro-gusa líquido e o sopro do oxigênio em um convertedor. Após as reações de oxidação, o aço é formado e é vazado nas lingoteiras, de onde segue para a unidade de resfriamento. Depois segue para a unidade de escarfagem (processo que consiste na retirada de uma camada superficial das placas de aço, a fim de eliminar os defeitos). As emissões na unidade da aciaria ocorrem pela queima de combustível nos fornos de aquecimento, pelo processo de dessulfuração do ferro-gusa e na etapa de escarfagem.

A queima de combustíveis utilizados nos fornos para aquecimento de placas das áreas de laminação a quente e a frio geram também particulados que têm grande facilidade de dispersão devido sua baixa densidade.

3.1.2 Material particulado na atmosfera

Na atmosfera, as partículas, dependendo da sua origem, são denominadas de aerossóis primários ou secundários. São primários se são emitidos diretamente das fontes emissoras. Por outro lado, se são formados na atmosfera, são considerados secundários.

A FIG. 3.1 mostra os aerossóis típicos encontrados na atmosfera.

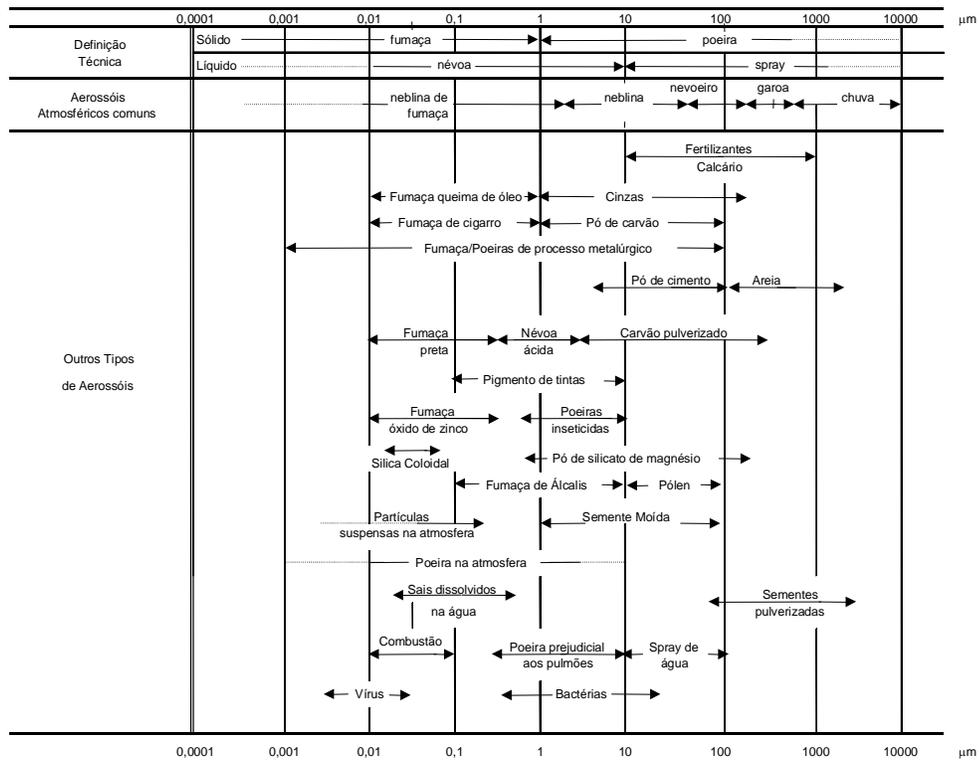


FIGURA 3.1 - Aerossóis típicos encontrados na atmosfera.

Fonte: MALM, W. C. (2000)

3.1.3 Distribuição de tamanho de partículas

O tamanho de partículas caracterizado, por meio da análise do diâmetro, é um importante parâmetro físico na determinação das propriedades, efeitos e destino dessas partículas na atmosfera. Existem diversas classificações de tamanho. A USEPA cita o modo, a dosimetria e o diâmetro de corte como as mais utilizadas.

A classificação por modo baseia-se nas distribuições de tamanho de partículas observadas e em mecanismos de formação. A FIG. 3.2 ilustra essa distribuição.

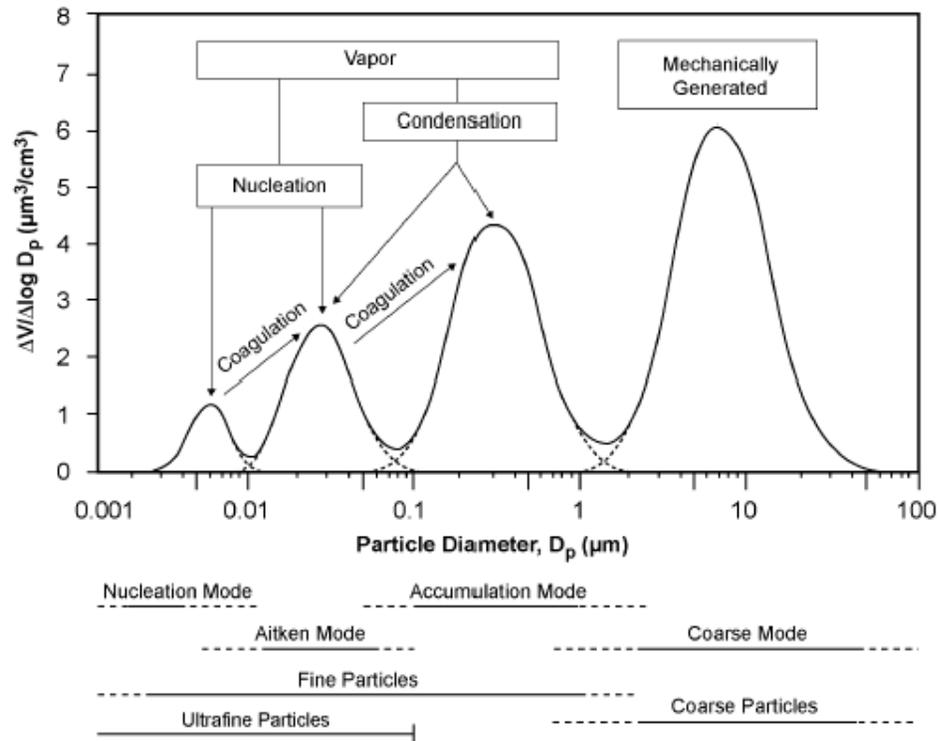


FIGURA 3.2 - Distribuição de tamanho de partículas na atmosfera.

Fonte: USEPA (2004)

Existem 3 modos de distribuição. Os modos *nuclei*, *accumulation* e *coarse*.

Os modos *nuclei* e *accumulation* apresentam partículas de diâmetro inferior a 2,5 μm e estão associados aos mecanismos de formação de partículas a partir de componentes gasosos (conversão do gás em partícula). São eles: condensação, nucleação e coagulação.

Para a condensação acontecer é preciso avaliar as condições atmosféricas, como a temperatura ambiente, a umidade relativa e, principalmente, a pressão de vapor, a área superficial e os constituintes dos gases.

No processo de nucleação, os gases interagem para formar aerossóis maiores. Uma vez formados, os aerossóis podem crescer ainda mais pelo processo de coagulação, no qual as partículas são bombardeadas umas às outras e passam a crescer juntas. A FIG. 3.3 mostra um exemplo da conversão do gás dióxido de enxofre em partícula de sulfato.

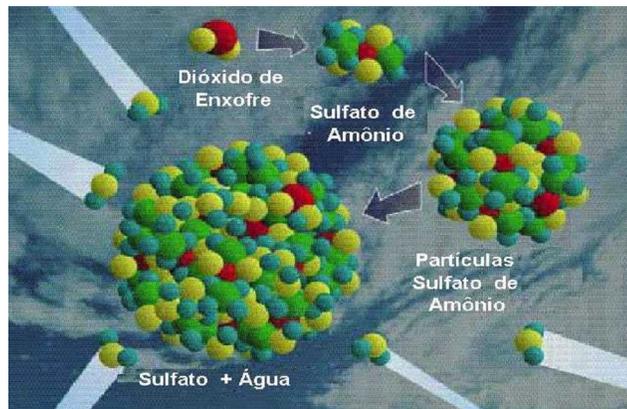


FIGURA 3.3 - Conversão do gás dióxido de enxofre em partículas de sulfato.

Fonte: MALM, W. C. (2000)

No modo *coarse*, as partículas maiores que 2,5 μm são originadas por processos mecânicos de extração de minerais e restos de materiais orgânicos.

A classificação segundo a dosimetria é baseada em termos do tamanho de partículas que conseguem atravessar os vários canais do sistema respiratório humano. Desse modo, as partículas podem ser classificadas como: inaláveis (IPM), torácicas (TPM) ou respiráveis (RPM).

As partículas inaláveis são aquelas que entram pelo trato respiratório. As torácicas atravessam a laringe e podem chegar ao pulmão e as respiráveis são as que efetivamente atingem esse órgão, na região de troca de ar.

Outra forma de classificação de partículas é pela eficiência de sua coleta em equipamentos de monitoramento e controle atmosférico. As frações de tamanho são especificadas com um diâmetro de corte de 50%. Assim, as partículas são classificadas em: PTS, PM_{10} e $\text{PM}_{2,5}$.

As partículas totais em suspensão, TSP, são definidas pelo equipamento amostrador de grandes volumes, *Hi vol*. O tamanho deve variar entre 25 e 50 μm . As PM_{10} são as partículas coletadas em equipamento (50 % de eficiência de coleta) com diâmetro aerodinâmico inferior a 10 μm e as $\text{PM}_{2,5}$, são aquelas abaixo de 2,5 μm .

A FIG. 3.4 mostra a penetração das partículas no trato respiratório em função de seu tamanho.

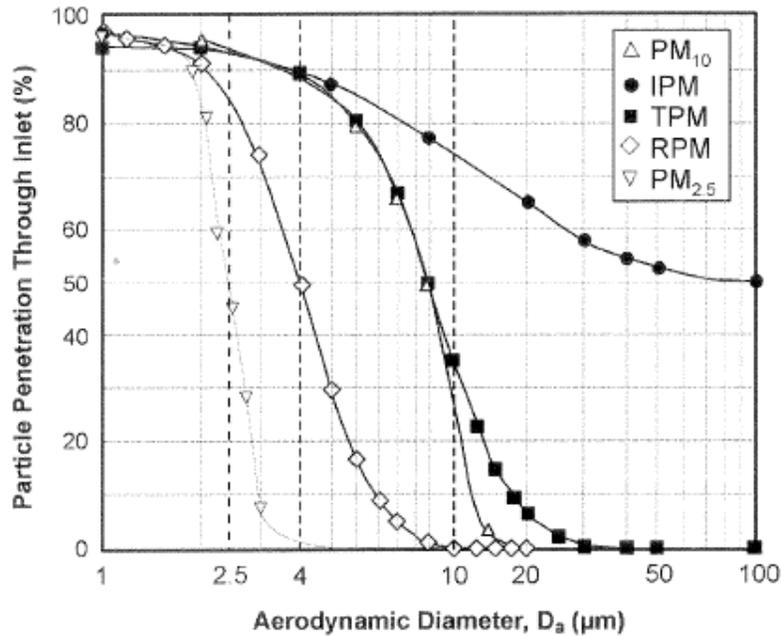


FIGURA 3.4 - Curva de penetração de partículas no sistema respiratório em função de seu tamanho.

Fonte: USEPA (2004)

3.1.4 Efeitos sobre a saúde humana

Segundo SALVI, S. e HOLGATE, S.T. (1999), mais de 60 estudos de epidemiologia conduzidos em várias regiões do mundo mostraram que existe uma forte associação entre a exposição ao ambiente poluído por material particulado e os índices de mortalidade infantil, casos de asma, bronquite crônica, infecções do trato respiratório, doenças do coração e derrames. SPURNY, K.R. (1998), salienta que as partículas finas abaixo de 2,5 μm , são as principais responsáveis pelo agravamento da saúde da população. Segundo este autor, os metais de transição como Fe, Mn, V e Ni, que representam os principais constituintes inorgânicos dessas partículas, são co-participantes da formação de radicais livres via reação de *Fenton* (DONALDSON, et al. (1996)).

No corpo humano, esses radicais afetam as atividades das células, promovendo a redução de antioxidantes e conseqüente oxidação de proteínas, entre outras. As partículas contendo constituintes orgânicos, como PAH (hidrocarbonetos poliaromáticos), em sua maioria

provenientes de processos de combustão, são absorvidas por partículas ultrafinas como as fuligens e afetam a saúde humana caso sejam inaladas. Segundo POPE et al. (2002), a longa exposição a partículas muito finas pode elevar o fator de risco de mortalidade cardiopulmonar. Isso ocorre sobretudo com crianças e a população acima dos 60 anos.

3.1.5 Efeitos na atmosfera: redução da visibilidade e chuva ácida

A visibilidade é regida pela dispersão da luz. Para entender como ocorre a sua redução, é preciso avaliar como a luz interage com as partículas e os gases presentes na atmosfera.

A redução de visibilidade é causada pela dispersão e absorção da luz solar pelas partículas presentes na atmosfera. Quando o céu está limpo, a cor azul predominante é causada pela dispersão da luz pelas moléculas do ar atmosférico (espalhamento de *Rayleigh*). Nesse caso, podem ser vistos objetos escuros a longas distâncias com facilidade. Já em ambientes poluídos com elevada presença de aerossóis, a luz pode ser dispersa ou absorvida e a visibilidade é menor.

A dispersão ou absorção de luz pelas partículas dependerá do seu tamanho, do seu índice de refração e de sua forma. MIE (1908) estimou individualmente para partículas esféricas (0,1 a 1 μm) a sua absorção e dispersão. Os gases poluentes como o NO_2 têm também um elevado poder de absorção de luz (espectro do visível) e, por isso, contribuem significativamente para a redução da visibilidade.

A chuva ácida está associada à elevada emissão de partículas de nitrato para a atmosfera, originadas da queima de combustíveis fósseis. Outros compostos também contribuem, mas em grau menor, como os sulfatos, os cloretos, a amônia e o CO_2 . Os efeitos destas partículas no ambiente dependem da sua deposição.

Nos solos, a chuva ácida arrasta nutrientes indispensáveis ao desenvolvimento da planta. Alguns metais como o alumínio e o manganês são liberados e são nocivos a elas. Já nos rios e lagos, a queda de pH pode provocar a mortandade de peixes. Além disso, a quantidade de bactérias e algas pode ser alterada, interferindo na decomposição da matéria orgânica e no ciclo formador de nutrientes. A deterioração de monumentos históricos e a corrosão de ferroligas são também atribuídas à chuva ácida.

3.2 Modelagem por Redes Neurais Artificiais

A modelagem por redes neurais artificiais (ANN) consistem em estimar os pesos de cada variável de entrada introduzida na rede de forma que a variável resposta seja a mais próxima da real possível. Existem vários algoritmos que realizam essa atividade. Basicamente, diferem entre si na forma como são realizados os ajustes dos pesos. A escolha pelo algoritmo a ser utilizado deve-se basear nas tarefas as quais se deseja realizar. Basicamente, prestam-se para classificação ou reconhecimento de padrões, aproximação de funções, predição e controle. Devido a essa versatilidade, as ANN têm sido bastante aplicadas em diversas áreas do conhecimento e em especial na modelagem ambiental, foco deste estudo. As avaliações consistem na estimativa de impactos ambientais atmosféricos em decorrência da emissão de poluentes atmosféricos.

3.2.1 Histórico

Historicamente, as ANN surgiram a partir das idéias de McCULLOCH e PITTS (1943). Juntos publicaram o artigo *A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity* que introduzia os primeiros conceitos sobre esses sistemas. HEBB (1949) desenvolveu modelos de sistemas, hoje ainda utilizados em vários algoritmos matemáticos.

Em 1962, uma nova abordagem em sistemas de treinamento foi introduzido por ROSENBLATT. Segundo seu modelo, denominado de Perceptron, as ANN poderiam ser treinadas para classificar certos tipos de padrões e executar determinados tipos de funções. WIDROW (1976) desenvolveu o algoritmo mínimo quadrado médio (LSM), que foi utilizado no modelo chamado *Adaline*. Nesta época, acreditava-se que as redes neurais artificiais seriam capazes de modelar qualquer função. No entanto, MINSK e PAPERT (1980) demonstraram que o perceptron apresentava certas limitações, como a solução de problemas não linearmente separáveis. Estas limitações persistiram até a metade da década de 80, quando foi desenvolvido o modelo perceptron de multicamadas. Isto foi o bastante para a retomada do desenvolvimento dos estudos sobre esse assunto, aliado ao enorme avanço da tecnologia, sobretudo no campo da microeletrônica.

3.2.2 Analogia aos Neurônios Biológicos

O cérebro consiste num sistema de estruturas interligadas denominadas de neurônios. Segundo SHEPERD e KOCH (1990) existem cerca de 10 bilhões.

No cérebro humano, as informações, na forma de um pulso elétrico, são recebidas pelos dendritos dos neurônios e seguem à árvore dendrítica ou corpo celular, onde são processadas. Ultrapassado um limite de ação, dispara-se um segundo impulso, que produz uma substância neurotransmissora, a qual pode fluir do corpo celular para o axônio e, depois, até as sinapses. As sinapses consistem na ligação ou na passagem do sinal entre os axônios de um neurônio e os dendritos de outro. A substância neurotransmissora pode produzir uma conexão sináptica excitatória ou inibitória. Uma conexão excitatória provoca uma alteração no potencial da membrana, que contribui para a formação de um impulso nervoso que difunde dentro da região intersináptica, em direção à membrana pós-sináptica, atingindo o axônio de saída. Em outras palavras, a informação é processada e os sinais são transmitidos pelo axônio, até os dendritos de outros neurônios. Já a conexão inibitória age no sentido oposto. A FIG. 3.5 ilustra o mais comum deles.

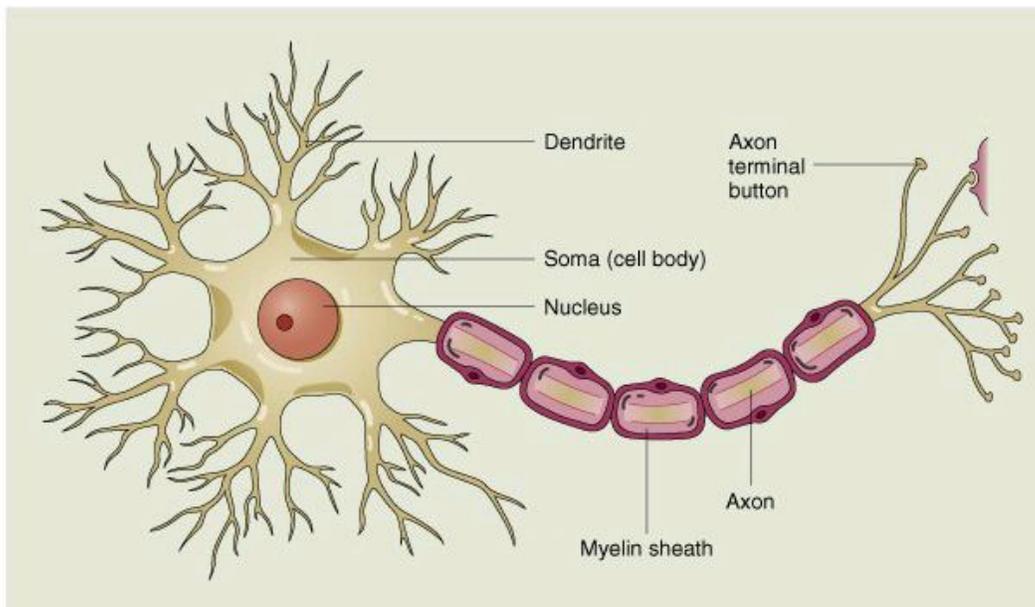


FIGURA 3.5 - Estrutura de um neurônio biológico.

Fonte: *University of Southern Maine* (2000).

As ANN apresentam estrutura similar aos neurônios biológicos (FIG. 3.6). Apresentam dados de entrada que correspondem aos pulsos nervosos que chegam aos dendritos, pesos (sinapses), função de ativação (corpo celular) e saída (axônio).

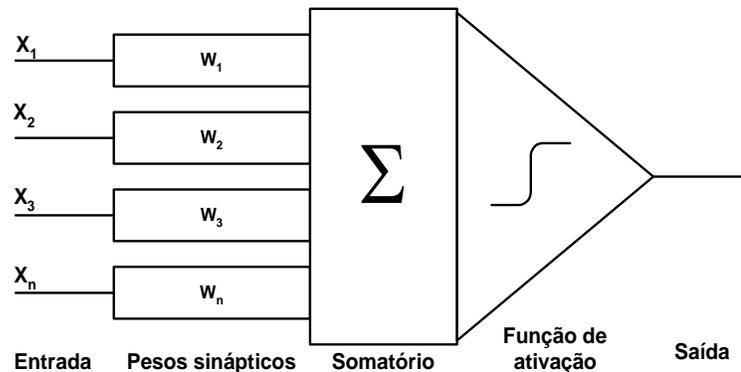


FIGURA 3.6 - Estrutura de um neurônio artificial.

3.2.2.1 Entrada

As entradas são representadas por X_1 , X_2 , X_n que multiplicados ao seus pesos W_1 , W_2 , W_n (sinapses) e somados a uma outra entrada, o termo b , também denominado de *bias* produzem a saída (equação 3.1). A saída é dependente da função de ativação.

$$\text{Saída} = \text{Função de ativação} (\sum X_n w_n + b) \quad (3.1)$$

Os pesos podem assumir valores positivos ou negativos. São responsáveis por ajustar os dados de entrada, de forma a obter o menor erro de modelagem.

3.2.2.2 Função de ativação

A função de ativação é também chamada de função de transferência. Essa função determina a relação entre a entrada e a saída de um neurônio na rede neural. Ela introduz um grau de não linearidade as redes e restringe a saída de um neurônio a um intervalo de amplitude finita.

Segundo HAYKIN (1999), existem 3 tipos básicos de função de ativação. São elas: a de limiar, a linear e a sigmoide.

A função de limiar é representada como (equação 3.2):

$$y = \begin{cases} 1, & \text{para } y \geq 0 \\ 0, & \text{para } y < 0 \end{cases} \quad \begin{matrix} E \geq 0 \\ E \leq 0 \end{matrix} \quad (3.2)$$

O modelo que utiliza essa função, irá apresentar a saída do neurônio igual a 0, para valores negativos e 1, para valores positivos.

A função linear é representada conforme mostrado na equação 3.3:

$$y = x \quad (3.3)$$

A função sigmoideal também chamada de logística, cuja curva apresenta um formato em *s*, pode ser definida de acordo com a equação 3.4:

$$y = \frac{1}{1 + \exp(-x)} \quad (3.4)$$

Essa função é a mais popular das funções de transferência. O seu intervalo está compreendido entre 0 e 1, ao contrário da de limiar que apenas pode ser 0 ou 1. Quando se deseja obter um intervalo maior, normalmente se utiliza a função tangente hiperbólica. Nesse caso, o intervalo passa a ser entre -1 e 1.

Normalmente, em uma rede neural podem ser empregados diferentes tipos de funções de ativação nos neurônios de uma mesma camada ou não. Segundo ZHANG, G. (1998), a maioria dos estudiosos utilizam a função logística nas camadas intermediárias, mas não existe nenhum consenso sobre qual função deve se utilizar na camada de saída. Outros já usam a função linear nas duas camadas quando se deseja modelar problemas de predição. A verdade é que até o momento, nenhum estudo indicou qual deve ser a melhor função de transferência a se utilizar.

3.2.2.3 Saída

A saída *Y* representa os valores de saída.

3.2.3 Modelos de Redes Neurais

No desenvolvimento de qualquer modelo de rede neural é primordial a definição do modelo de rede ou arquitetura a ser utilizada. Existe uma variedade de redes neurais artificiais disponíveis, mais de 50 tipos (BASHEER, I.A. e HAJMEER, M. (2000)) utilizada na classificação ou reconhecimento de padrões, agrupamentos, aproximação de funções, predição e otimização.

A aproximação de funções, foco deste estudo, envolve um treinamento de um conjunto de variáveis de entrada e de saída por uma ANN, de forma a obter uma correlação entre as entradas e as saídas (FIG. 3.9). As redes MLP são consideradas como aproximadores universais de funções.

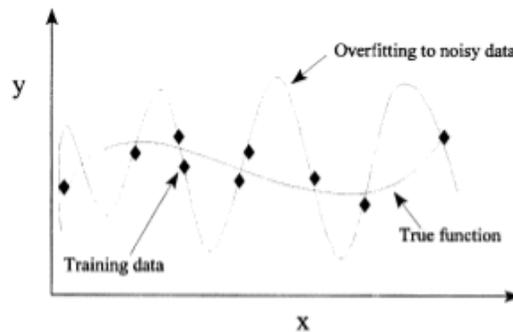


FIGURA 3.7 - Aproximação de funções.

Fonte: BASHEER, I.A. e HAJMEER, M. (2000)

3.2.3.1 Modelo de rede neural perceptron de multicamadas

O modelo de rede neural perceptron de multicamadas (MLP), segundo GARDNER, M.W. e DORLING, S.R. (1998) é o que mais tem sido citado em literatura científica na modelagem ambiental. Especificamente na predição de material particulado, são várias as publicações. PEREZ, P, TRIER A. e REYES, J. (2000) propuseram a estimativa de concentração horária de material particulado inalável de 2,5 μm ($\text{PM}_{2.5}$) com horas de antecedência, usando o modelo de redes neurais tipo perceptron de multicamadas em Santiago, no Chile. A rede utilizada apresentava como entrada valores de concentração das partículas inaláveis coletados 24 horas antes e dados meteorológicos horários como temperatura, umidade e direção dos

ventos. A comparação entre esse modelo e o de regressão simples foi realizada e verificou-se que o de redes neurais artificiais apresentou os melhores resultados.

KUKKONEN, J. PARTANEN, L. et al. (2003) estimaram a concentração de NO_2 e PM_{10} em Helsinki, a partir da simulação de vários modelos de rede tipo MLP, utilizando dentre outros parâmetros de entrada, o fluxo de veículos e os dados meteorológicos. LU, W.Z et al. (2001) também estimaram a concentração de partículas em suspensão na cidade de Hong Kong, por meio da aplicação das ANN tipo. Essa modelagem apresentou resultados satisfatórios. CORANI (2005) propôs a estimativa de partículas inaláveis de $10 \mu\text{m}$ (PM_{10}) e ozônio e para isso utilizou uma rede tipo MLP, obtendo bons resultados. Outros autores também propuseram estudos semelhantes: LINYAN, S. WANG, Y. (1995), WAL, J.T., JANSSEN, L.H.J.M (2000), PEREZ, P. REYES, J. (2001), VIOTTI, P., LIUTI, G., GENOVA, P.D (2002), ZICKUS, M., GREIG, A.J., NIRANJAN, M. (2002), PEREZ, P. REYES, J. (2002), PODNAR, D., KORACIN, D., PANORSKA, A. (2002), ORDIERES, J.B. et al. (2005), HOOYBERGHS, J. et al. (2005).

As redes neurais de multicamadas (MLP) caracterizam-se por apresentar camadas de neurônios interligados uns aos outros. Conforme FIG. 3.11, têm uma camada de entrada, uma ou mais camadas ocultas e uma camada de saída.

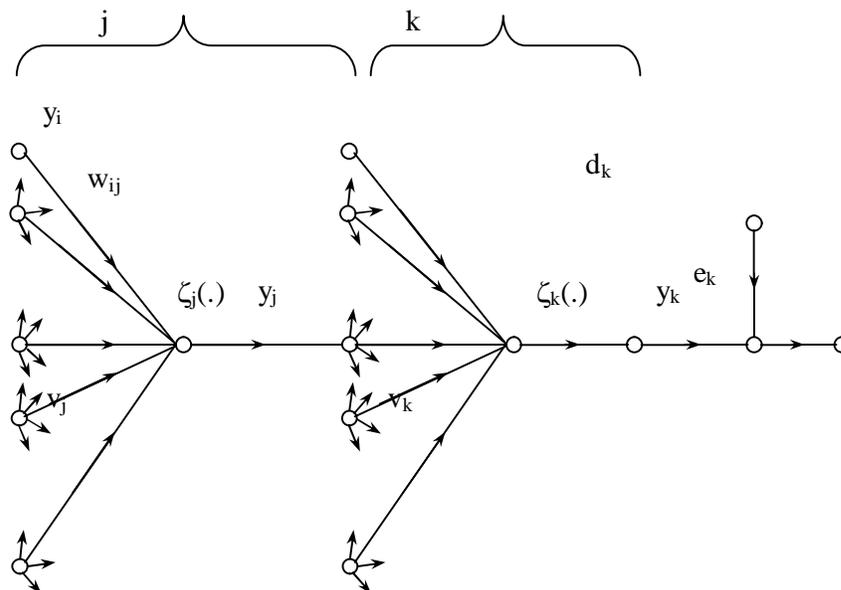


FIGURA 3.8 - Grafo de uma rede MLP.

Na camada de saída são introduzidos os neurônios que representam as variáveis respostas a serem modeladas. Esses neurônios por sua vez consistem na combinação dos processamentos realizados pelos neurônios da camada anterior (camada intermediária) interligados a eles, sendo totalmente conectados. Isso define a direção de processamento da informação e, por isso, esse tipo de rede é conhecida com sendo alimentada adiante ou *feed forward*. As camadas ocultas ou intermediárias são responsáveis pela avaliação dos neurônios da camada de entrada. Nessa camada são alimentadas as variáveis explicativas da modelagem.

3.2.4 Camada de neurônios de entrada

Na camada de entrada são introduzidas as variáveis explicativas do fenômeno em estudo. O número de neurônios dessa camada corresponde à quantidade de variáveis utilizadas para preverem os valores de saída. A dificuldade maior consiste na escolha delas. Vários autores têm utilizado ferramentas estatísticas para auxiliá-los nessa escolha. OLIVEIRA, O. (2003), por exemplo, utilizou a análise do erro quadrático médio (MSE) para definir as suas. Segundo esse autor, em um etapa da modelagem, usam-se todas aquelas que apresentem uma influência sobre a variável dependente. O erro gerado é então utilizado como referência. Em seguida, retira-se uma a uma e verifica se o erro obtido irá aumentar ou reduzir. Caso aumente, isso significa que a variável retirada do sistema é significativa e não deve ser eliminada. Do contrário, ela tem pouca relevância e pode ser desconsiderada. HAYKIN (1999) e LU, et al. (2003), por sua vez, aplicaram a análise estatística multivariável de componentes principais ou PCA. Essa ferramenta é um método que busca extrair o máximo de informações de um conjunto de dados, analisando a estrutura da covariância entre eles. A covariância é uma medida da relação entre duas variáveis e, portanto, a análise de sua estrutura (o modo como se relacionam) pode revelar as principais causas da variabilidade da variável de interesse em estudo. Dessa forma, por meio dessa análise, o número de variáveis de entrada é reduzido e essas novas variáveis passam a ser chamadas de componentes principais.

3.2.5 Camada de neurônios oculta ou intermediária

A camada intermediária é responsável por extrair todas as informações ou características dos padrões de entrada e mapear o grau de não linearidade entre os padrões de entrada e saída. A definição do número de camadas ocultas dependerá do modelo de rede a ser utilizada e a aplicação desejada. Para ZHANG, G., et al. (1998), as redes modelo MLP necessitam apenas de uma camada oculta para a modelagem de problemas envolvendo predição.

A quantidade de neurônios nessa camada pode ser estimada por tentativa e erro. WONG, (1991) sugere que essa quantidade seja igual $2ne$, KANG (1991), $\frac{ne}{2}$, e KÓVACS (2002), a $2ne + 1$, onde ne representa o número de neurônios da camada de entrada.

3.2.6 Camada de neurônios de saída

Na camada de saída são introduzidas as variáveis respostas. O número de neurônios da camada de saída está relacionado ao problema em estudo. Assim, esse número está relacionado diretamente com a quantidade da variável de interesse a ser modelada.

3.2.7 Algoritmos de aprendizagem

Os algoritmos de aprendizagem apresentam a função de ajustar os parâmetros livres da rede (pesos e *bias*) neural, que pode ser realizada de forma supervisionada ou não.

Na aprendizagem supervisionada, também denominado de aprendizagem com um professor, o ajuste ocorre a fim de obter um elo entre os pares de entrada e saída alimentados na rede neural, de forma a obter o menor erro possível na modelagem. O professor tem o conhecimento sobre o problema em estudo, representado pelo conjunto de pares de entrada e de saída que, por sua vez, é desconhecido à rede neural. Caso uma parte desse conjunto seja treinado pela rede neural, então o professor é capaz de fornecer a rede a saída desejada. Essa saída é determinada pelo treinamento da rede e pela função erro (FIG. 3.12).

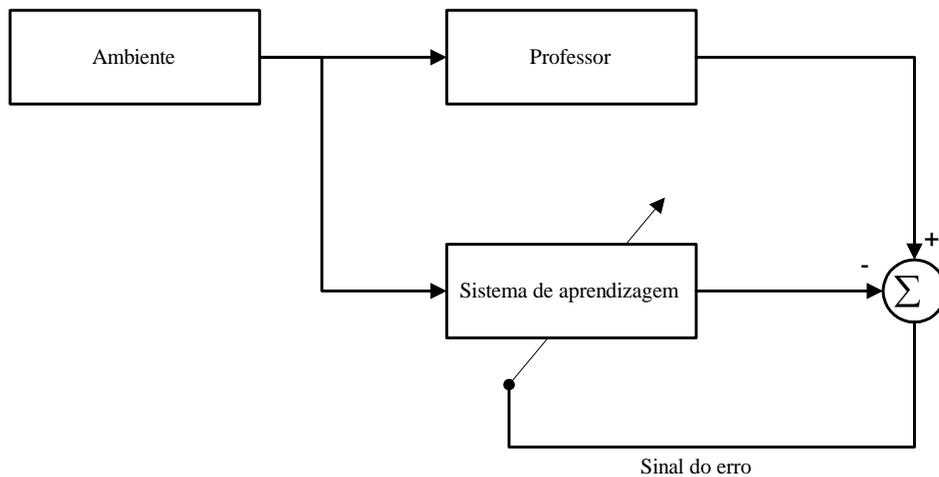


FIGURA 3.9 - Aprendizagem supervisionada

No aprendizado não supervisionado, não são fornecidos os padrões de saída. O ajuste ocorre entre os padrões de entrada baseado nas suas características em comum. Não são fornecidos exemplos a serem seguidos.

Existe uma variedade de algoritmos de aprendizagem. Diferenciam-se somente na forma como os pesos sinápticos da rede são atualizados, a fim de reduzir o erro produzido. Numa rede MLP, o mais conhecido e utilizado deles é denominado de retropropagação de erros ou *Backpropagation* (BP).

3.2.7.1 Algoritmo *Backpropagation*

Como ocorre em todos os métodos supervisionados, no algoritmo *Backpropagation* os pesos são ajustados e atualizados a fim de que o sinal de saída seja o mais próximo do desejado. O ajuste inicial dos pesos é realizado usualmente a partir de valores aleatórios. A rotina desse algoritmo se desenvolve em duas etapas que ocorrem em sentidos alternados na rede desenvolvida. Em uma etapa denominada de propagação (*forward*) é definida uma saída para um determinado padrão de entrada. Essa saída é comparada com o dado de saída desejado e o erro é gerado. Na outra etapa (retropropagação ou *backward*), esse erro é utilizado para atualizar os pesos das conexões sinápticas (FIG. 3.13).

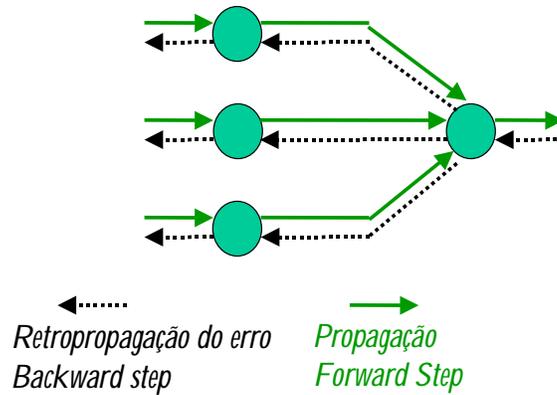


FIGURA 3.10 - Esquema de propagação e retropropagação do erro.

Matematicamente, este algoritmo pode ser mostrado na equações 3.5 a 3.27, conforme sugerido por HAYKIN (1999). Considerando a FIG. 3.8, que representa o neurônio j sendo alimentado por um conjunto de sinais de entrada. O v_j representa o somatório de todos os sinais de entrada (equação 3.5) que chegam à função de ativação $\zeta(\cdot)$.

$$v_j = \left(\sum_{i=0}^m w_{ji} y_i \right) \quad (3.5)$$

O erro e_j é definido como:

$$e_j = d_j - y_j \quad (3.6)$$

A função erro é expressa como a soma dos erros quadrados conforme descrito na equação 3.7:

$$e = \frac{1}{2} \sum_{j \in C} (e_j)^2 \quad (3.7)$$

Então, o erro na saída do neurônio j , na iteração n é dada conforme equação 3.8:

$$e = \frac{1}{2} (d_j - y_j)^2 \quad (3.8)$$

Como os pesos são os parâmetros a serem modificados, a função erro é aplicada em relação a

eles e pode ser representada pela derivada parcial $\frac{\partial}{\partial w_{ji}} e$. Aplicando a regra da cadeia, obtêm-se:

$$\frac{\partial}{\partial w_{ji}} e = \frac{\partial}{\partial e_j} e \left(\frac{\partial}{\partial y_j} e_j \right) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial v_j} y_j \right) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial w_{ji}} v_j \right) \quad (3.9)$$

Diferenciando ambos os lados da equação 3.7 em relação ao erro e_j , obtêm-se:

$$\frac{\partial}{\partial e_j} e = e_j \quad (3.10)$$

Diferenciando ambos os lados da equação 3.6 em relação a y_j , obtêm-se:

$$\frac{\partial}{\partial y_j} e_j = -1 \quad (3.11)$$

O sinal de saída do neurônio j é dependente da função de ativação aplicada. Diferenciando-se a saída y_j em relação a v_j , obtêm-se:

$$\frac{\partial y_j}{\partial v_j} = (\zeta'(v_j)) \quad (3.12)$$

Diferenciando ambos os lados da equação 3.5 em relação a w_{ji} , obtêm-se:

$$\frac{\partial}{\partial w_{ji}} v_j = y_i \quad (3.13)$$

O uso das equações 3.10 a 3.13 produz:

$$\frac{\partial e}{\partial w_{ij}} = -e_j (\zeta'(v_j) y_i) \quad (3.14)$$

A correção Δw_{ji} aplicada a w_{ji} é definida pela regra delta:

$$\Delta w_{ji} = \eta \delta_j \cdot y_i \quad (3.15)$$

onde o gradiente local δ_j é definido por:

$$\delta_j = - \left(\frac{\partial}{\partial v_j} e_j \right) \quad (3.16)$$

$$\delta_j = \frac{\partial}{\partial e_j} e \left(\frac{\partial}{\partial y_j} e_j \right) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial v_j} y_j \right)$$

$$\delta_j = e_j \zeta'(v_j)$$

Sendo o neurônio j um nó oculto, pode-se reescrever a equação 3.16 como:

$$\delta_j = \left(\frac{\partial}{\partial y_j} e_j \right) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial v_j} y_j \right) \quad (3.17)$$

$$\delta_j = \left(\frac{\partial e_j}{\partial y_j} \right) (\zeta'(v_j))$$

Para calcular a derivada parcial $\left(\frac{\partial}{\partial y_j} e_j \right)$ utiliza-se a equação 3.7, com o índice k no lugar do índice j . Então, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial y_j} e = \sum_k e_k \cdot \frac{\partial}{\partial y_j} e_k \quad (3.18)$$

Aplicando a regra da cadeia:

$$\frac{\partial}{\partial y_j} e = \sum_k e_k \cdot \frac{\partial}{\partial v_k} e_k \cdot \frac{\partial}{\partial y_j} v_k \quad (3.19)$$

Entretanto, nota-se que:

$$e_k = d_k - y_k \quad (3.20)$$

$$e_k = d_k - \zeta(v_k) \quad (3.21)$$

Assim, têm-se:

$$\frac{\partial e_k}{\partial v_k} = -\zeta'(v_k(n)) \quad (3.22)$$

De acordo com a FIG. 3.1 para o neurônio k pode-se escrever:

$$v_k = \sum_{j=0}^m w_{kj} y_j \quad (3.23)$$

Diferenciando em relação a y_j :

$$\frac{\partial v_k}{\partial y_j} = w_{kj} \quad (3.24)$$

Utilizando as equações 3.22 e 3.24 em 3.19, obtêm-se a derivada parcial:

$$\frac{\partial e}{\partial y_j} = -\left(\sum_k e_k \cdot \zeta'(v_k) \cdot w_{kj} \right) \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial e}{\partial y_j} = -\left(\sum_k \delta_k \cdot w_{kj} \right)$$

Finalmente utilizando a equação 3.25 em 3.17, obtêm-se a fórmula de retropropagação para o gradiente local δ_j

$$\delta_j = \zeta'(v_j) \cdot \sum_k \delta_k \cdot w_{kj} \quad (3.26)$$

O termo de momento é incluído na regra delta conforme mostrado na equação 3.27:

$$\Delta w_{ji} = \eta \delta_j \cdot y_i + \mu \Delta w_{ji} \quad (3.27)$$

3.2.7.2 Algoritmo Levenberg-Marquadt

O algoritmo *Levenberg-Marquadt* baseia-se no método modificado de Newton denominado de *Gauss Newton*. Segundo HAYKIN (1999), o método de Gauss-Newton é aplicável a função custo que é expressa como a soma dos erros quadrados conforme descrito anteriormente.

O sinal de erro $e(n, w)$ é uma função do vetor peso ajustável w e pode ser representada na forma matricial:

$$e(n, w) = e(n) + J(n)(w - w(n)) \quad (3.28)$$

onde $e(n)$ é o vetor de erro:

$$e(n) = (e(1), e(2), \dots, e(n))^t \quad (3.29)$$

A matriz jacobiana $J(n)$ n por m de $e(n)$:

$$J(n) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial w_1} e(1) & \frac{\partial}{\partial w_2} e(1) & \dots & \frac{\partial}{\partial w_m} e(1) \\ \frac{\partial}{\partial w_1} e(2) & \frac{\partial}{\partial w_2} e(2) & \dots & \frac{\partial}{\partial w_m} e(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial}{\partial w_1} e(n) & \frac{\partial}{\partial w_2} e(n) & \dots & \frac{\partial}{\partial w_m} e(n) \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

A jacobiana $J(n)$ é a transposta da matriz de gradiente m por n :

$$\nabla e(n) = [\nabla e(1), \nabla e(2), \dots, \nabla e(n)] \quad (3.31)$$

O vetor de peso atualizado $w(n+1)$ é assim definido por:

$$w(n + 1) = \operatorname{argmin}\{ \frac{1}{2}\|e(n, w)\|^2 \} \quad (3.32)$$

Calculando a norma euclidiana quadrática, obtêm-se:

$$\frac{1}{2}\|e(n, w)\|^2 = \frac{1}{2}\|e(n)\|^2 + e^T(n)J(n)(w - w(n)) + \frac{1}{2}(w - w(n))^T J^T(n)J(n)(w - w(n)) \quad (3.33)$$

Assim diferenciando em relação a w e igualando a zero, têm-se:

$$J^T(n)e(n) + J^T(n)J(n)(w - w(n)) = 0 \quad (3.34)$$

Resolvendo a equação 3.35 para w , tem-se:

$$w(n + 1) = w(n) - (J^T(n)J(n))^{-1}J^T(n)e(n) \quad (3.35)$$

O treinamento com esse algoritmo é finalizado quando o mínimo global da função erro é atingido. Dependendo da função a modelar, principalmente a não linear pode haver mais de um erro local mínimo. O desejável é que o algoritmo não encerre o treinamento nesse mínimo e sim no global. Existem 2 parâmetros que são utilizados na busca do erro global mínimo. Um é a taxa de aprendizagem (η) e o outro é o termo de momento (μ).

A taxa de aprendizagem determina o tamanho dos passos durante o processo iterativo de treinamento. Se o passo for grande, pode ocorrer uma oscilação na rede e é provável que não se alcance o erro global mínimo. Por outro lado, se o passo for pequeno, o treinamento será muito longo e esse mínimo pode também não ser atingido. Um valor constante dessa taxa deve ser utilizado durante todo o processo de aprendizagem. WYTHOFF (1993) sugere entre 0,1 e 1.

O termo de momento é utilizado para auxiliar quando o processo iterativo permanece no mínimo local. Este parâmetro acelera a atualização dos pesos quando há a necessidade de reduzir o valor de η para evitar a oscilação da rede durante o treinamento. Um alto valor de μ deve reduzir o risco da rede permanecer estagnada ao mínimo local, mas, essa ação pode aumentar o erro obtido. Se esse valor for baixo, o treinamento da rede será lento e o modelo obtido talvez não seja satisfatório.

ZUPAN e GASTEIGER (1991) recomendam $(\mu + \eta)$ igual a 1. SWINGLER (1996) utiliza o valor de μ igual a 0,9 e η igual a 0,25 para a resolução de todos os problemas. Segundo

GARDNER, M.W. e DORLING, S.R. (1998), com a adição de uma determinada proporção de peso da iteração anterior na iteração seguinte, é possível se consiga sair do mínimo local e a o algoritmo de fato encontre o erro global.

3.2.7.3 Heurísticas

Dentre as heurísticas para melhorar o desempenho dos algoritmos de aprendizagem, sobretudo o de retropropagação, HAYKIN (1999) sugere:

- introduzir os padrões de entrada e de saída na rede neural de uma maneira aleatória,
- normalizar os padrões de entrada da rede e quando modelar problemas de predição normalizar também os padrões de saída,
- utilizar a função de ativação logística quando modelar problemas de classificação e, de acordo com ZHANG, G. et al. (1998), usar a função tangente hiperbólica para problemas de predição,
- iniciar os parâmetros livres da rede (o valor de peso e termo b) com valores também aleatórios.

3.2.8 **Treinamento**

O conjunto de dados utilizados na fase de treinamento pode ser subdividido em 3 subconjuntos denominados de treinamento, teste e validação ou em apenas 2 (treinamento e validação). O subconjunto de dados de treinamento é utilizado para atualizar os pesos das redes e deve ser suficientemente grande para cobrir as possíveis variações do problema em questão. O treinamento constitui-se na etapa mais importante de construção da rede. Os outros subconjuntos, distintos entre si, são responsáveis pela verificação da aprendizagem da rede.

A dinâmica de ajuste de pesos durante a etapa de treinamento pode ser realizada por ciclos (épocas) e sua quantidade é determinada por tentativa e erro.

O treinamento não deve ser longo, ou seja, com uma grande quantidade de ciclos, pois pode gerar ruído à modelagem, causando o super ajuste ou *overfitting*. Por outro lado, um pequeno número de ciclos pode ser insuficiente para que a rede memorize ou aprenda todas as informações pertinentes à obtenção de um modelo satisfatório. Para resolver esse dilema,

alguns autores como BAUM e HAUSSLER (1989) propõem que o tamanho mínimo do subconjunto treinamento seja igual ao número de pesos da rede vezes o inverso do erro desejado. Já DOWLA e ROGERS (1995) sugerem que a relação dados de treinamento/peso seja maior que 10. Outros pesquisadores, como LOONEY (1996), recomendam que os dados sejam divididos na proporção de 65% para treinamento, 25% para a fase de teste e 10% para a validação.

O critério de parada de treinamento usualmente utilizado é denominado de validação cruzada ou *early stopping*. Nesse método, os conjuntos de dados de treinamento e de validação, durante a fase de treinamento, são utilizados juntos. Na verdade, são simulados da seguinte forma: a um determinado número de iterações durante a modelagem, o treinamento com os dados a serem treinados é interrompido para simular o conjunto de dados de validação. Geralmente, o erro de treinamento passa a decrescer a cada ciclo. O erro de validação também apresenta inicialmente esse mesmo comportamento, mas, em seguida, eleva-se devido ao processo de memorização e super ajuste durante a etapa de aprendizagem. O ponto ótimo ou a melhor configuração da rede é alcançado quando esse erro de validação começa a aumentar (FIG. 3.14).

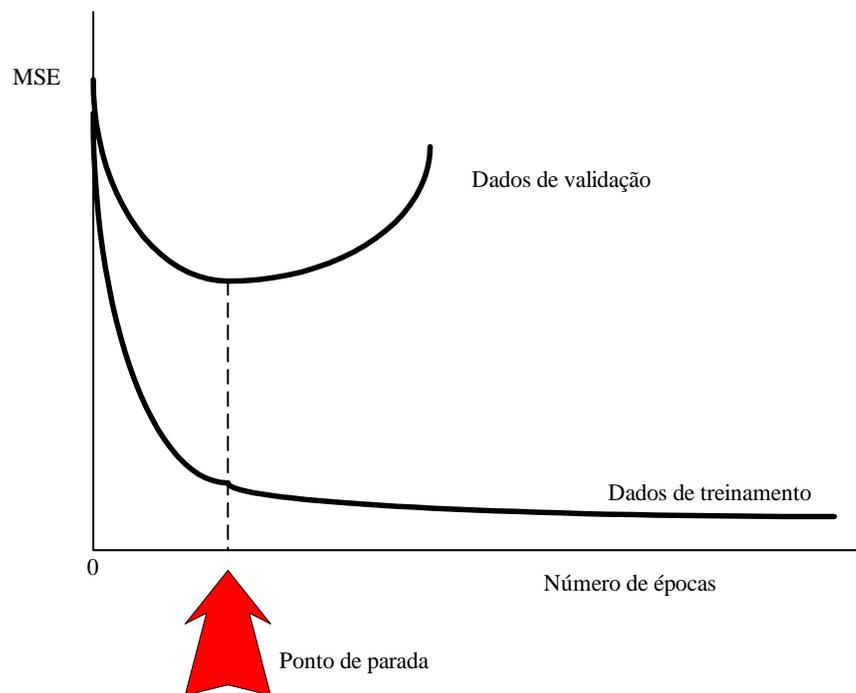


FIGURA 3.11 - Validação cruzada.

3.2.9 Normalização dos dados

Devido à diferente natureza dos dados utilizados na modelagem, é necessário que sejam normalizados dentro de intervalo limitado, de forma a evitar que valores elevados sobreponham os menores. Esse intervalo é dependente da função de ativação.

Para a função sigmoideal tangente hiperbólica, por exemplo, os valores das variáveis de entrada são distribuídos entre $(-1, 1)$. Para a avaliação de performance dos modelos, a operação inversa é realizada para se obter o valor real de cada saída calculada pela rede (DEMUTH e BEALE (1997)). Para parâmetros que apresentem um intervalo elevado, BASHEER, I. A. e HAJMEER, M. (2000) recomendam que seja feito o logaritmo dos dados.

3.3 Modelo matemático ISCST3

O modelo matemático *ISCST3* é recomendado pela USEPA e largamente utilizado nos países desenvolvidos na avaliação da dispersão dos poluentes na atmosfera.

O modelo é alimentado por meio de algumas variáveis como, dados meteorológicos horários (direção dos ventos, velocidade dos ventos, temperatura ambiente e radiação solar), altura da camada de mistura e emissão de poluente das fontes poluidoras em g/s, além de curvas de relevo da região em estudo.

Com base nestes dados, o modelo é capaz de estimar o valor de concentração de material particulado ou outro poluente em pontos receptores a cada hora e também em curtos períodos de tempo e de sazonalidade (inverno, verão, primavera, outono), simulando a média e a máxima diária.

As fontes emissoras consideradas no modelo podem ser pontuais, de área, de volume ou de linha. As fontes pontuais representam aquelas emissões provenientes de chaminés. Já as de área, volume e de linha não apresentam um canal lançador. Na verdade, emitem diretamente suas emissões na atmosfera e são conhecidas como fontes fugitivas. As fontes área ou de volume podem representar, por exemplo, áreas de estocagem de matéria-prima e as de linha podem ser correias transportadoras ou representar o transporte de matéria-prima em vagões de trem ou caminhões.

O valor de concentração simulado pelo modelo é baseado na distribuição de *Gauss* (equação 3.23) e é calculado para cada ponto da malha receptora num raio de até 50 km. Tanto as fontes receptoras quanto as emissoras são convertidas em um sistema de coordenadas cartesianas.

$$c = \frac{QVD}{2\pi u_s \sigma_y \sigma_z} \cdot \exp\left(-0,5\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right), \quad (3.36)$$

onde:

Q : representa a emissão de dióxido de enxofre dado em g/s,

V : termo vertical,

D : termo de decaimento,

σ_y, σ_z : coeficientes de dispersão,

u_s : velocidade do vento na altura de lançamento da fumaça.

O modelo, através dos seus algoritmos para a determinação da concentração em pontos receptores, introduz avaliações do relevo em estudo, do termo de decaimento, referente aos processos de reações químicas que envolvem os poluentes na atmosfera, e dos efeitos de deposição a seco e a úmido. Além disso, considera os efeitos de *Downwash*, que são os efeitos da dispersão da fumaça, em função de barreiras físicas, como os prédios e as dimensões das chaminés. Finalmente, o modelo introduz algoritmos para o cálculo da ascensão da fumaça e sua penetração nas camadas de inversão térmica.

Um detalhamento maior sobre essa modelagem pode ser realizado, consultando o estudo desenvolvido por MITKIEWICZ, G. (2002).

3.4 Análise de Performance

A análise de performance de um modelo geralmente é definida em termos do seu erro, que consiste na comparação entre os valores reais e os valores estimados.

Existem diversos métodos disponíveis na literatura para melhorar essa análise de comparação. IRWIN (1999) sugere que nas avaliações de performance de modelo de dispersão seja utilizado o valor de concentração real ou observado que representa o valor máximo do arco gerado pela pluma de poluição. A comparação entre esse valor máximo e o valor estimado pelo modelo deve ser feita a várias distâncias da fonte emissora. Outras abordagens, como a de OLESEN (1997), sugerem que a comparação seja entre o valor de concentração real, determinada próxima ao eixo central da pluma de poluição gerada pela fonte emissora e o valor estimado pelo modelo também nesse local. Propõe ainda que os dados de concentração coletados nas estações de monitoramento sejam classificados em casos com propriedades físicas semelhantes, como, por exemplo, em função das condições meteorológicas locais.

Os modelos de dispersão podem utilizar ainda um fator de correção ao valor de concentração estimada. Esse fator também chamado de *background* é baseado nas emissões geradas por fontes não consideradas pelo modelo. Em condições ideais, este fator poderia ser obtido em uma região com as mesmas características daquela em estudo, livre da influência das fontes poluidoras avaliadas.

Existe uma variedade de ferramentas de análise estatística disponíveis. Cada uma apresenta vantagens e limitações. Por isso, não existe um consenso sobre qual deve ser a mais apropriada para um determinado problema.

Os quatro métodos de análise utilizados neste estudo foram: coeficiente de correlação linear (R), erro médio quadrático (MSE), *fractional bias* (FB) e índice de conformidade (IA) (SHU, et al. 2006). Um modelo perfeito resultaria em valores de $R = 1$, $MSE = 0$, $FB = 0$ e $IA = 1$.

O coeficiente de correlação linear (R) é dado pela equação 3.24:

$$R = \frac{\left(C_e - \bar{C}_e\right)\left(C_r - \bar{C}_r\right)}{\sigma_{C_e} \sigma_{C_r}} \quad (3.37)$$

O erro médio quadrático (MSE) é dado pela equação 3.25:

$$MSE = \frac{\sum(C_r - C_e)^2}{n} \quad (3.38)$$

A análise de *fractional bias* (FB) é mostrada na equação 3.26:

$$FB = \frac{C_e - C_r}{0.5(C_e + C_r)} \quad (3.39)$$

A análise de índice de conformidade (IA) é mostrada na equação 3.27:

$$IA = 1 - \frac{(C_e - C_r)^2}{\left[\left| (C_e - \bar{C}_r) \right| + \left| (C_r - \bar{C}_e) \right| \right]^2} \quad (3.40)$$

onde:

C_e : é o valor de concentração estimado,

C_r : o valor concentração real, n é o tamanho amostral,

\bar{C}_e , \bar{C}_r : as médias dos valores de concentração estimados e reais, respectivamente,

σ_{C_r} : desvio padrão dos valores de concentração real,

σ_{C_e} : desvio padrão dos valores de concentração estimado.

4 MATERIAL E MÉTODOS

4.1 Coleta de dados

4.1.1 Dados de concentração de material particulado em suspensão

Para desenvolvimento da modelagem por redes neurais foram coletados dados semanais históricos de medição de concentração de material particulado em suspensão entre os anos de 1996 e 2004, provenientes dos 6 equipamentos *Hi vol* (FIG. 4.1) distribuídos pela cidade de Ipatinga. Foram coletados mais de 400 dados para cada estação de monitoramento.



FIGURA 4.1 - Equipamento *Hi vol* utilizado no monitoramento de PTS em Ipatinga.

Os equipamentos de monitoramento da qualidade do ar são gerenciados pela Empresa Siderúrgica local e estão distribuídos ao seu redor, nos bairros Cariru (CA), Bom Retiro (BR), Bairro das Águas (BA), Novo Cruzeiro (NC), Ferroviários (Escritório Central) (EC) e Castelo (CS). Esse monitoramento é realizado periodicamente a cada 7 dias. Na FIG. 4.2 é mostrada a localização geográfica desses pontos de monitoramento da qualidade do ar em Ipatinga.



FIGURA 4.2 - Localização das estações de monitoramento da qualidade do ar em Ipatinga.

4.1.2 Dados meteorológicos e temporais

Em paralelo, foram coletados os parâmetros meteorológicos horários de direção e velocidade dos ventos (m/s), chuva (mm), temperatura ambiente (°C) no mesmo período. Como as medições de concentração de material particulado em suspensão obtidas nas estações de monitoramento da qualidade do ar correspondem a um valor diário, foram obtidas as médias diárias de cada um desses parâmetros. Assim, para cada dia de monitoramento, foram determinadas as frequências de cada direção de ventos e a média da velocidade dos ventos registradas, temperatura e chuva no período. Foram ainda introduzidos como variáveis de entrada no modelo neural, os parâmetros calmaria, correspondendo a frequência média de velocidades de ventos inferiores a 1 m/s e a estação do ano (verão e inverno). Esta última foi introduzida de forma a verificar o efeito da sazonalidade nas emissões de material particulado em suspensão. A estação meteorológica utilizada está localizada no Bairro das Águas (FIG. 4.3).



FIGURA 4.3 - Estação meteorológica.

É composta por um anemômetro, que está localizado a 10 m acima do nível do solo e de um heliógrafo. O registro da direção dos ventos é realizado com a resolução de oito direções (N, NE, E, SE, S, SW, W, NW), e as velocidades inferiores a 1 m/s não são registradas.

4.2 Modelagem por Redes Neurais Artificiais

A rotina de modelagem por redes neurais artificiais foi desenvolvida, utilizando o *software Matlab R12* (anexo 1). As etapas de desenvolvimento da modelagem estão sintetizadas na FIG. 4.4.

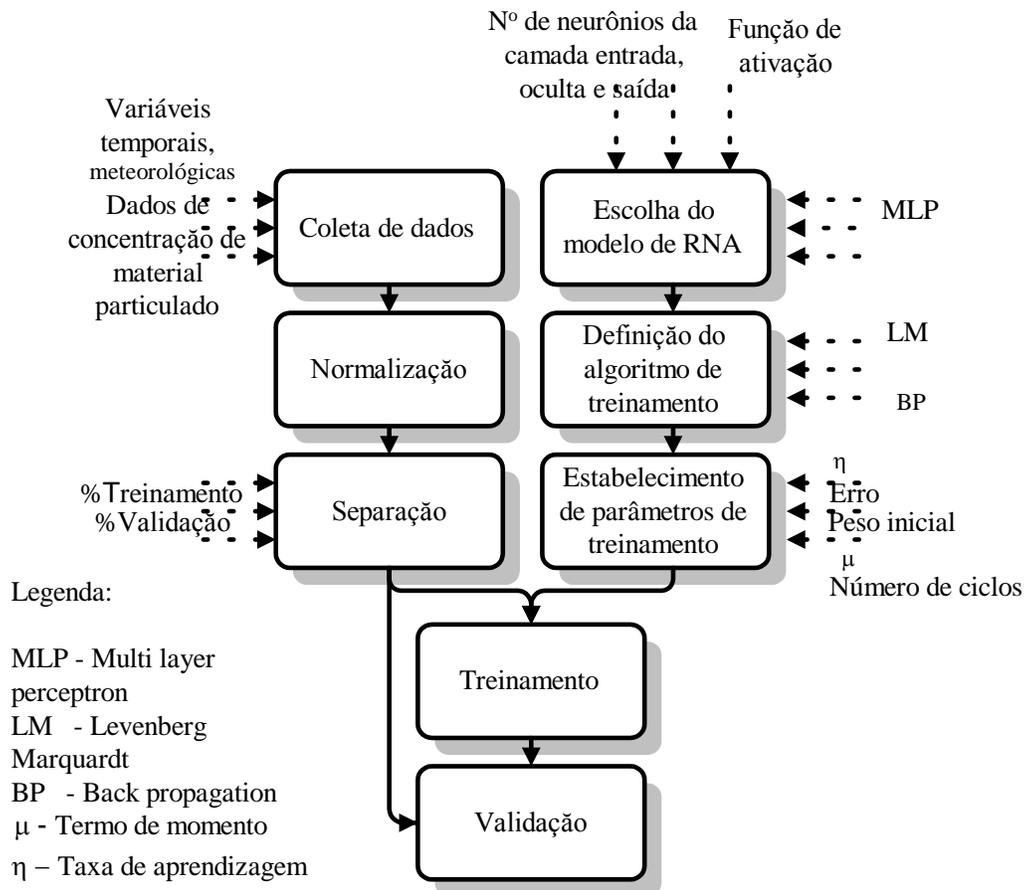


FIGURA 4.4 - Etapas de desenvolvimento da modelagem por rede neural.

Conforme mostrado na FIG. 4.4, os blocos representam as etapas de modelagem e as setas com linhas hachuradas apresentam os parâmetros a serem avaliados.

Na modelagem, testou-se o modelo tipo perceptron de multicamadas (MLP). A sua escolha deveu-se aos diversos estudos publicados, mostrando aplicação dele na estimativa de concentração de poluentes atmosféricos. Avaliaram-se diversas configurações de rede MLP. Foram modificadas a quantidade de neurônios da camada de entrada, da intermediária, da de saída e o algoritmo de aprendizagem. A melhor topologia de rede é definida com base na análise de erro médio quadrático (MSE). Essa análise é sugerida por ZHANG, G. et al. (1998) como sendo a mais eficiente na avaliação de modelos de redes neurais.

4.2.1 Camada de neurônios de entrada

Na camada de entrada foram utilizados como variáveis de entrada os parâmetros meteorológicos e temporais. A escolha desses parâmetros deveu-se a conhecimento adquirido em literatura. Estas variáveis de entrada foram introduzidas na modelagem da seguinte forma: a frequência diária das oito direções de ventos, média diária de velocidade dos ventos, média diária de temperatura ambiente e de chuva, frequência diária de calmaria e estações do ano, sendo o verão representado como número 1 e o inverno como 2. Ao todo foram utilizadas 13 variáveis de entrada.

Para a obtenção de um número menor dessas variáveis de entrada utilizou-se a ferramenta estatística multivariável de análise estatística de componentes principais, usando o *software statgraphics 5.0*. As variáveis de entrada passaram a ser os componentes principais obtidos das 13 originais utilizadas. Como os parâmetros de entrada e de saída são introduzidos juntos na rotina e a quantidade de dados de concentração de material particulado coletados variou de uma estação para outra, essa análise estatística foi aplicada em cada novo conjunto de entrada e saída proposto (seção 4.2.3).

4.2.2 Camada de neurônios intermediária

Na modelagem desenvolvida foi utilizada uma única camada oculta. O número de neurônios nessa camada variou conforme sugerido por WONG, (1991), KANG (1991) e KÓVACS (2002) (TAB. 4.1).

TABELA 4.1 - Configuração da camada oculta.

Camada de entrada	Quantidade de neurônios	
	Mínimo	Máximo
ne	ne/2	2ne + 1

ne - número de neurônios

Em outras palavras, se na modelagem o número de neurônios na camada de entrada utilizado foi igual 13, então o número de neurônios na camada oculta variou entre 7 e 27, totalizando nesse caso 20 possibilidades de configuração.

4.2.3 Camada de neurônios de saída

Na camada de saída foram utilizadas as medições de concentração de material particulado nos 6 pontos de monitoramento da qualidade do ar. A quantidade de nós dessa camada variou entre 1 e 6. Modelaram-se diferentes configurações da camada de saída. Ora optou-se em simular todos os resultados de concentração de material particulado das 6 estações de monitoramento, ora apenas um, referente ao resultado de uma única estação de monitoramento da qualidade do ar, conforme mostrado na TAB. 4.2.

Foi também avaliada a influência dos resultados obtidos da estação de monitoramento da qualidade do ar do Novo Cruzeiro (NC) sobre os resultados das outras estações. Isto foi motivado porque nessa estação são registrados maiores valores de concentração de material particulado em suspensão.

TABELA 4.2 - Configuração da camada de saída.

Número de neurônios	CA	BA	BR	EC	NC	CS
1	+	-	-	-	-	-
1	-	+	-	-	-	-
1	-	-	+	-	-	-
1	-	-	-	+	-	-
1	-	-	-	-	+	-
1	-	-	-	-	-	+
5	+	+	+	+	-	+
6	+	+	+	+	+	+

+ simulado
- não simulado

As simulações realizadas apresentaram as configurações conforme mostrado na TAB. 4.3.

TABELA 4.3 - Configurações propostas de redes neurais tipo MLP.

Neurônios					Estações de monitoramento					
Entrada		Oculta		Saída	CA	BA	BR	EC	NC	CS
Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo							
ne	13	ne/2	2ne + 1	1	+	-	-	-	-	-
ne	13	ne/2	2ne + 1	1	-	+	-	-	-	-
ne	13	ne/2	2ne + 1	1	-	-	+	-	-	-
ne	13	ne/2	2ne + 1	1	-	-	-	+	-	-
ne	13	ne/2	2ne + 1	1	-	-	-	-	+	-
ne	13	ne/2	2ne + 1	1	-	-	-	-	-	+
ne	13	ne/2	2ne + 1	5	+	+	+	+	-	+
ne	13	ne/2	2ne + 1	6	+	+	+	+	+	+

ne – quantidade de neurônios

+ simulado

- não simulado

Como os parâmetros livres da rede foram gerados aleatoriamente, para cada modelo criado foram realizadas 20 simulações. Ao final, após a comparação entre os valores reais e estimados obtidos pela análise do erro médio quadrático (MSE), definiu-se pela melhor topologia de rede (camada de entrada, camada intermediária e de saída).

4.2.4 Algoritmos de aprendizagem

Os algoritmos de aprendizagem usados no treinamento foram *Levenberg-Marquardt* e *Backpropagation*. No *software Matlab R12* esses algoritmos são conhecidos como LM e GDX, respectivamente.

Os resultados desses algoritmos obtidos nas simulações foram comparados entre si em termos da análise de erro quadrático médio e do tempo de treinamento realizado. Considerou-se a quantidade de neurônios na camada de entrada igual a 13, saída, 6, oculta entre 7 e 27.

4.2.5 Treinamento

O conjunto de dados de entrada e de saída foi dividido em 2 subconjuntos. Um de treinamento, correspondendo a 80 % dos dados, e outro de validação, 20% restantes (ZHANG, G. et al. (1998)).

Devido à diferente natureza desses dados, foram normalizados dentro de intervalo limitado (-1,1), de forma a evitar que valores elevados sobrepujassem os menores.

Com o objetivo de melhorar a performance, o conjunto de dados de entrada e saída foi introduzido na rede neural de forma aleatória. O critério de parada de treinamento utilizado foi a validação cruzada ou *early stopping*.

Na rotina foram estabelecidos os valores do erro esperado, do peso inicial, *bias b*, da função de ativação, do termo de momento (μ) e da taxa de aprendizagem (η) e quantidade de ciclos ou iterações.

4.2.6 Análise de Performance

A validação do modelo foi realizada pela comparação entre os valores estimados e os reais medidos pelo equipamento *Hi vol* nas 6 estações de monitoramento da qualidade do ar, correspondendo a 20 % dos dados.

Foi avaliada a tendência dos resultados simulados, se estavam superestimados ou subestimados pela análise do gráfico do 1º quartil e erros tipo I (falso negativo) e tipo II (falso positivo).

No erro tipo I, o modelo realiza uma estimativa do valor de concentração abaixo do valor crítico, padrão da Legislação Ambiental, quando, na verdade, deveria ser maior. No erro tipo II, ocorre o contrário. Os valores estimados são maiores quando deveriam ser menores. Em termos de modelagem o pior seria ocorrer o erro tipo I, pois nesse caso nenhuma ação de controle de poluição seria tomada e a qualidade do ar ficaria comprometida.

Procurou-se também avaliar a influência dos parâmetros de entrada sobre os parâmetros de saída. Para isso, foi utilizada a técnica estatística de agrupamentos ou análise de *Clusters*. Nessa análise, pode-se determinar o grau de similaridade entre as observações ou entre os parâmetros de entrada, utilizando um algoritmo matemático hierárquico.

O algoritmo utilizado foi o *Ward*. Este método procura associar os grupos com base na avaliação da variância gerada entre os agrupamentos formados. Assim, inicia-se o agrupamento com 2 grupos similares com menor número de observações, através da soma dos

quadrados da distância entre eles, procura-se minimizar a soma dos quadrados dos erros (SSE) (equação 4.1):

$$SSE = x_i^2 - \frac{\sum(x_i)^2}{n} \quad (4.1)$$

A tendência é ir aos poucos formando novos agrupamentos até que se igualem ao número de observações.

O método de avaliação de performance utilizado foi erro médio quadrático (MSE) para a obtenção da melhor topologia de rede. O erro percentual foi também assinalado. Os parâmetros livres peso (W), o bias (b) estabelecidos e a equação final obtida para cada estação de monitoramento da qualidade do ar foram também registrados.

4.3 Modelo matemático de dispersão ISCST3

Foi utilizado o modelo de dispersão *ISCST3* do *software BREEZE*. A simulação exigiu o levantamento dos parâmetros: dados meteorológicos, topografia da região da Ipatinga e determinação e caracterização das fontes emissoras. Esse levantamento foi realizado por MITKIEWICZ, G. (2002) em seu estudo.

Foram comparados os valores de concentração estimados dos 2 modelos matemáticos com os reais obtidos nas estações de monitoramento da qualidade do ar. As ferramentas estatísticas de avaliação utilizadas foram erro médio quadrático (MSE), *fractional bias* (FB), índice de conformidade (IA) e o coeficiente de correlação linear (R).

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 Coleta de dados

Os dados de concentração de material particulado em suspensão coletados semanalmente entre os anos de 1996 e 2004 nas seis estações de monitoramento da qualidade do ar são mostrados nas FIG. 5.1 a 5.6.

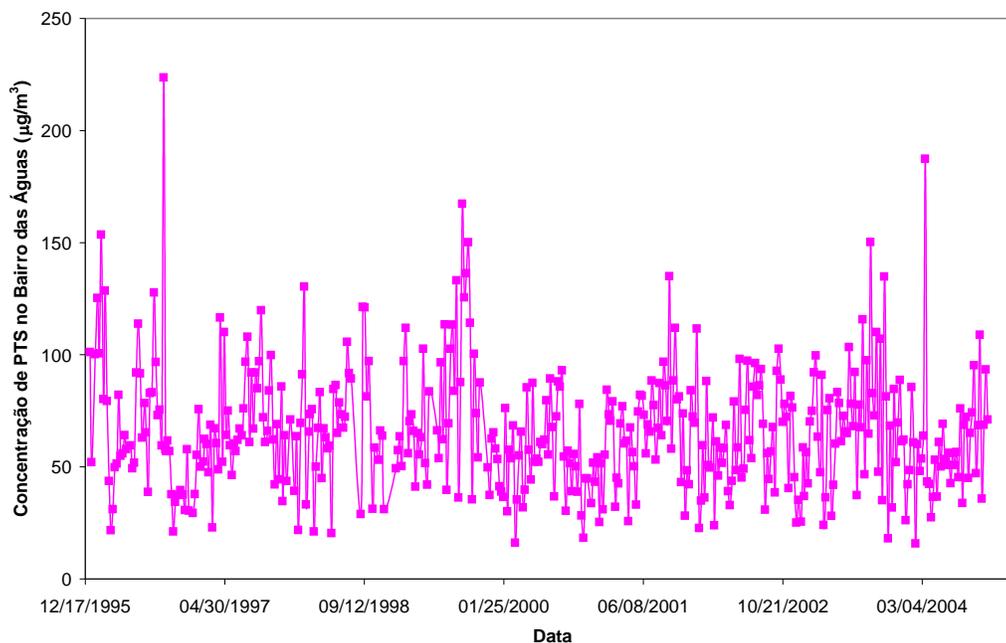


FIGURA 5.1 - Valores reais de concentração de PTS obtidos na estação do Bairro das Águas.

A estação de monitoramento do Bairro das Águas apresenta valores de concentração de material particulado em suspensão em torno de $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$, com desvio padrão em torno de $26 \mu\text{g}/\text{m}^3$ e a do Bom Retiro em torno de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3 \pm 17 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (FIG. 5.2).

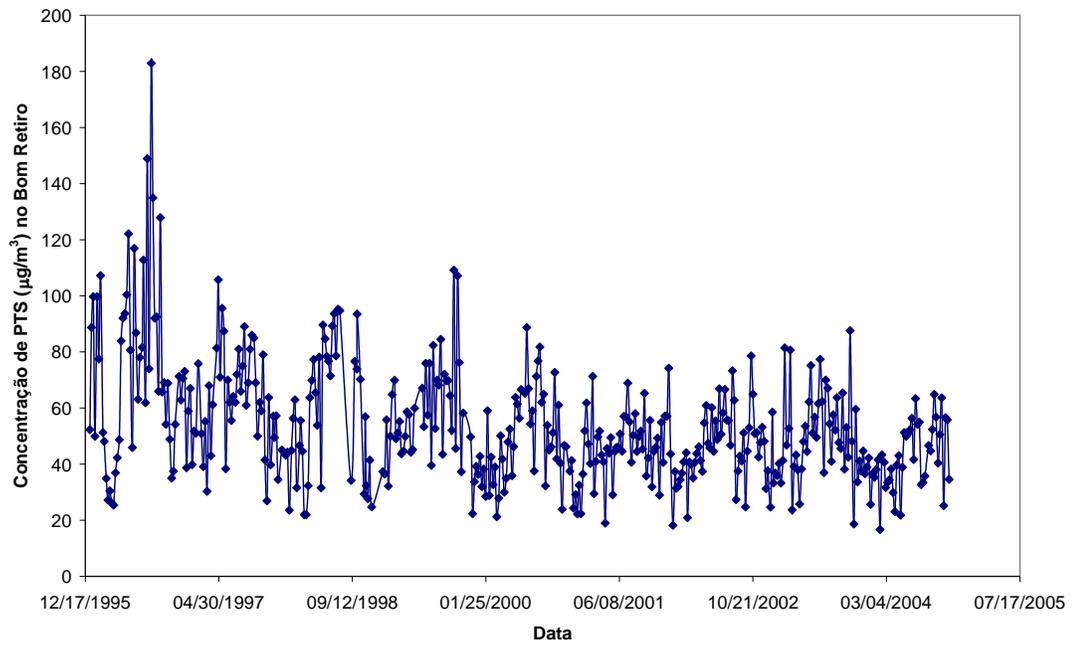


FIGURA 5.2 - Valores de concentração reais de PTS obtidos na estação do Bom Retiro.

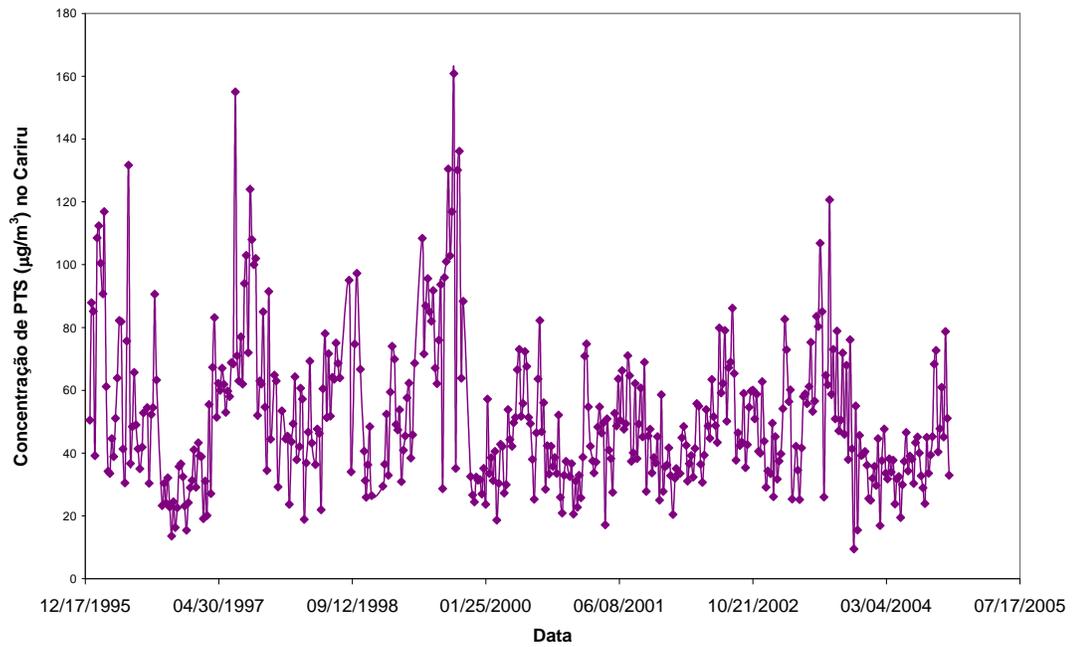


FIGURA 5.3 - Valores de concentração reais de PTS na estação do Cariru.

Na estação de monitoramento do Cariru foram encontrados valores médios de concentração de material particulado em suspensão também em torno de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ e desvio padrão de $23 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

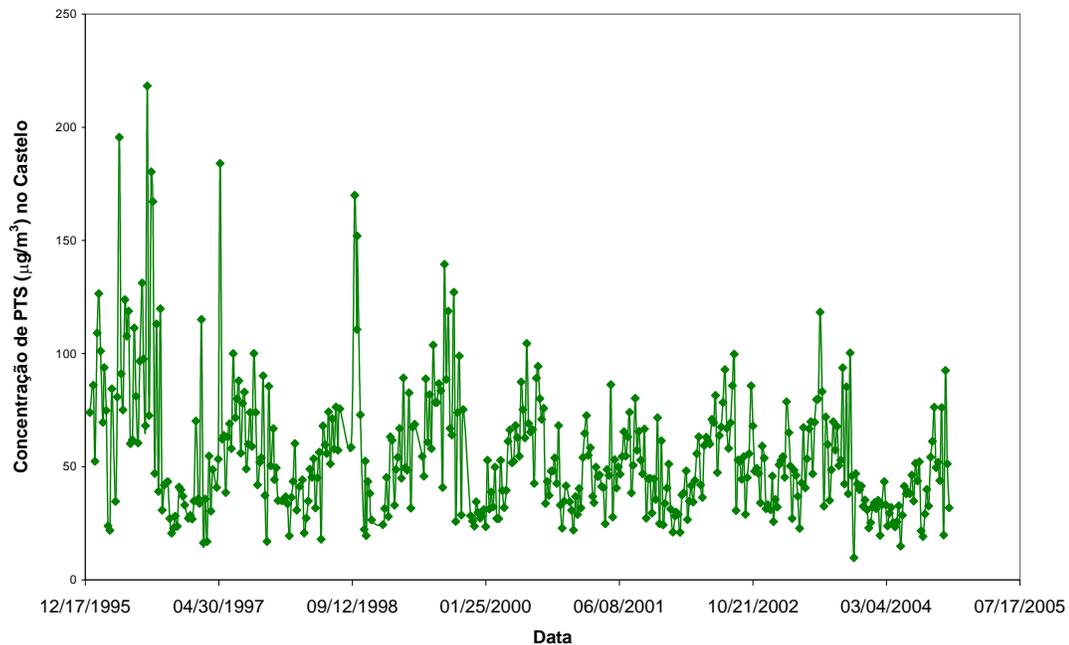


FIGURA 5.4 - Valores de concentração reais de PTS obtido na estação do Castelo.

Durante o período de coleta, a estação de monitoramento do Castelo apresentou também valores médios de concentração de material particulado em suspensão em torno de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3 \pm 23 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Já a estação de monitoramento do Escritório Central apresentou valores médios de concentração de material particulado em suspensão em torno de $40 \mu\text{g}/\text{m}^3 \pm 19 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (FIG. 5.5).

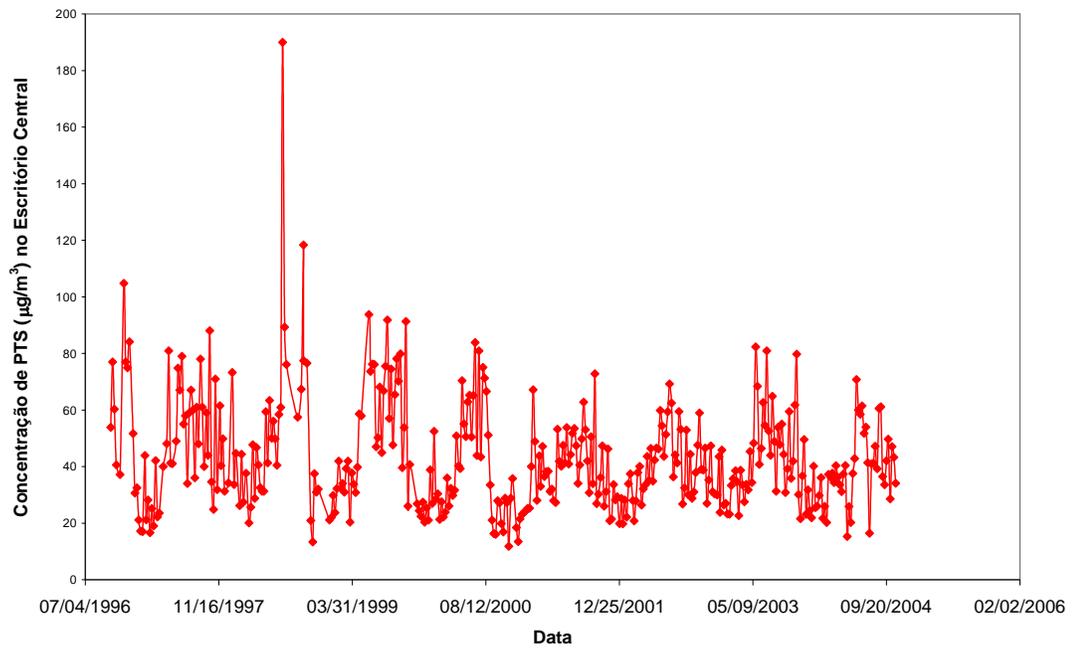


FIGURA 5.5 - Valores de concentração de PTS medidos na estação do Escritório Central.

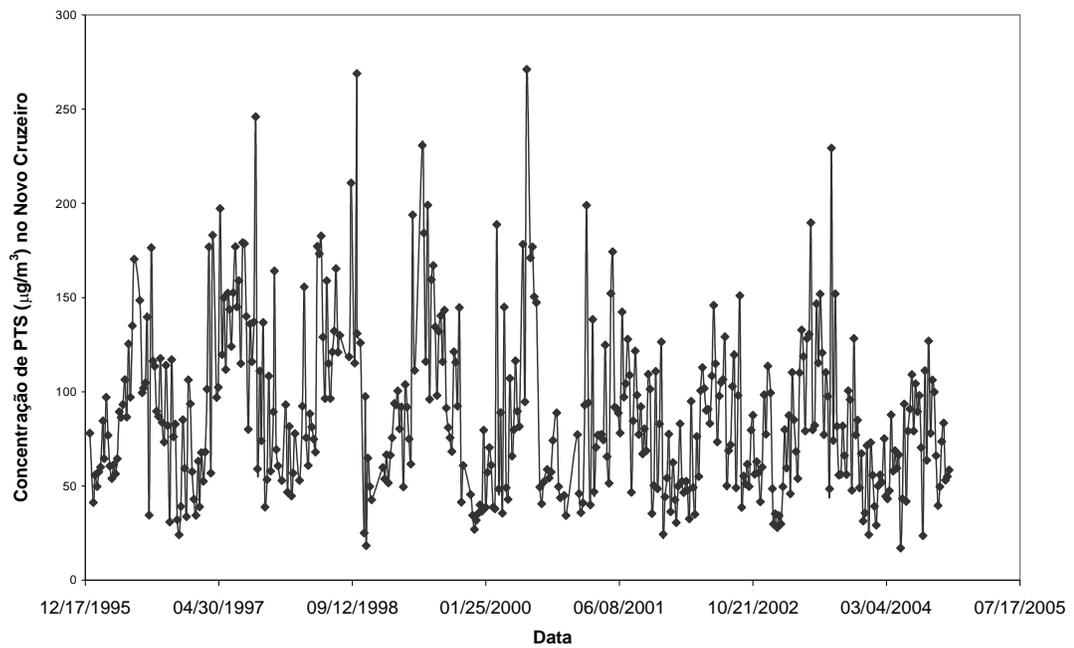


FIGURA 5.6 - Valores de concentração de PTS medidos na estação do Novo Cruzeiro.

De acordo com a FIG. 5.6, a estação de monitoramento do Novo Cruzeiro apresenta valores de concentração de material particulado em suspensão em torno de $80 \mu\text{g}/\text{m}^3 \pm 45 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

Os dados meteorológicos de direção, velocidade dos ventos registrados no período de 1996 a 2004 são mostrados em formato de rosa dos ventos (FIG. 5.7).

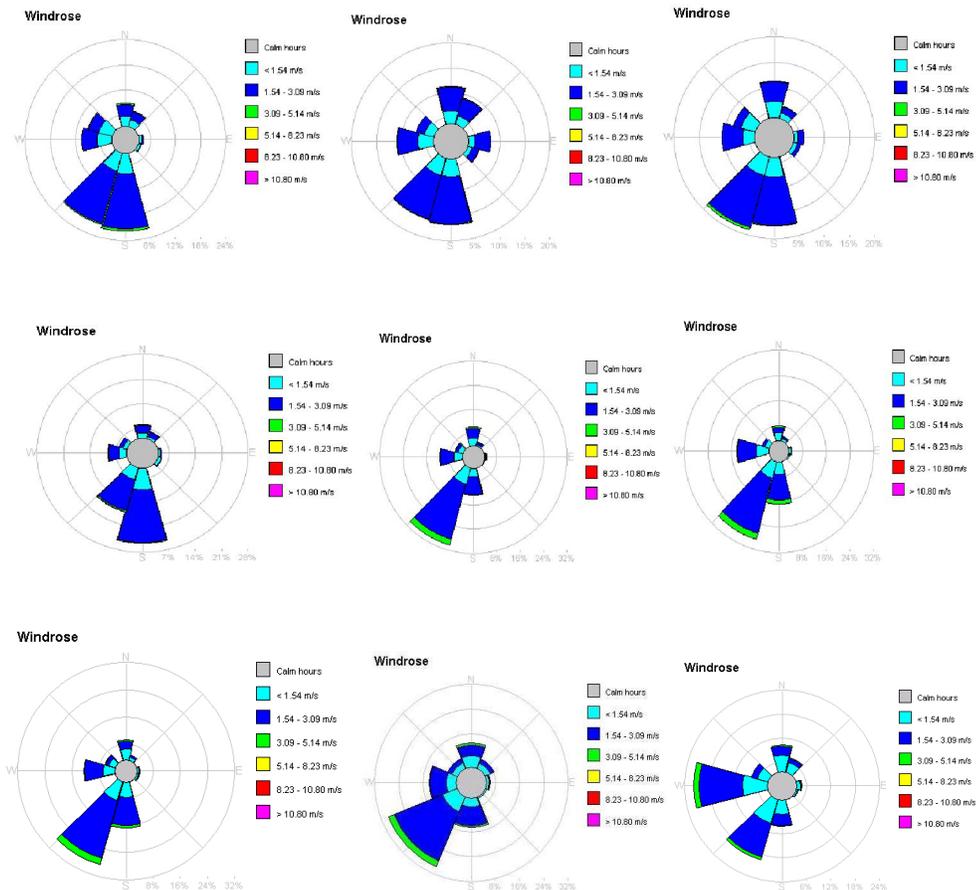


FIGURA 5.7 - Frequência de direção e velocidade dos ventos entre 1996 a 2004.

O regime de ventos na região de Ipatinga apresenta direção dominante norte e nordeste. As velocidades médias variam abaixo de 3 m/s.

Os dados médios de temperatura ambiente e chuva no período de 1996 a 2004 são mostrados na FIG. 5.8.

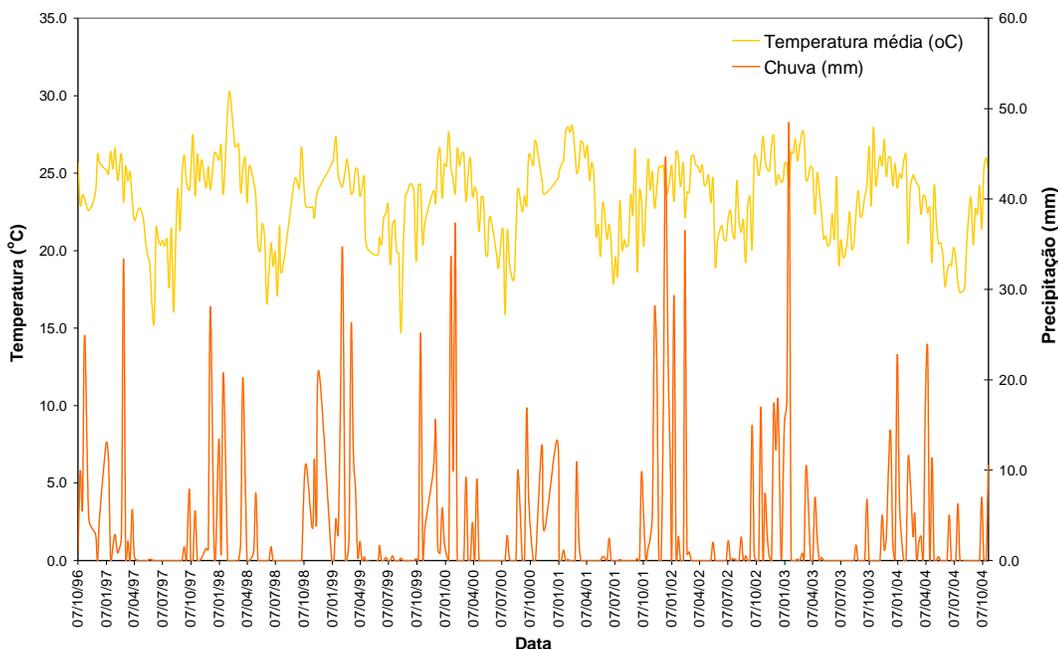


FIGURA 5.8 - Valores médios diários de temperatura (°C) e chuva (mm).

Ipatinga, caracteriza-se por ser uma cidade quente com temperaturas médias em torno de 25°C durante praticamente todo o ano, com exceção dos meses de maio a agosto em que a média está próxima a 20°C. O mês de fevereiro é considerado o mais quente e as temperaturas são superiores a 30°C. As chuvas são mais frequentes nos meses de novembro, dezembro e março, podendo ocorrer também em janeiro, porém, sem muita frequência. As médias diárias são inferiores a 15mm.

5.2 Modelagem por redes neurais

5.2.1 Camada de neurônios de entrada

O número máximo de neurônios na camada de entrada foi igual a 13. Para a redução desse número de neurônios utilizou-se a ferramenta estatística de componentes principais, por meio do software *statgraphics 5.0* (TAB. 5.1).

TABELA 5.1 - Resultados de análise de componentes principais.

Neurônios da camada de saída							PCA
CA	BA	BR	EC	NC	CS	PC	% Acumulado
+	-	-	-	-	-	6	74,5
-	+	-	-	-	-	5	66,7
-	-	+	-	-	-	6	74,4
-	-	-	+	-	-	6	75,0
-	-	-	-	+	-	6	74,6
-	-	-	-	-	+	6	74,5
+	+	+	+	-	+	6	74,9
+	+	+	+	+	+	6	74,9

+ simulado

- não simulado

PC - componentes principais

PCA - Análise de componentes principais

Por essa análise, foram extraídos 6 componentes principais que explicaram mais de 70% da variabilidade dos dados de entrada utilizados em cada uma delas, com exceção dos dados de entrada da estação de monitoramento do Bairro das Águas. Nessa análise, foram necessários apenas 5 componentes principais para explicar mais de 65% da variabilidade dos dados.

Os componentes principais obtidos foram utilizados como as novas variáveis de entrada para a obtenção de um outro modelo de rede neural.

5.2.2 Camada de neurônios intermediária

A quantidade de neurônios na camada intermediária variou de acordo com o número de neurônios utilizados na camada de entrada (TAB. 5.2).

TABELA 5.2 - Variação da quantidade de neurônios na camada intermediária.

Camada de entrada	Camada oculta	
	Mínimo	Máximo
5	3	11
6	3	13
13	7	27

Para a camada de entrada de 5 neurônios, ou seja, utilizando os 5 componentes principais obtidos para a análise do bairro das Águas foram simulados entre 3 e 11 neurônios na camada intermediária. Para 6 neurônios na camada de entrada, correspondendo aos 6 componentes principais obtidos, foram simulados entre 3 e 13 neurônios na camada intermediária e, finalmente, considerando a situação original, com 13 neurônios, foram avaliados entre 7 e 27 neurônios na camada oculta.

5.2.3 Camada de neurônios de saída

A partir das 20 simulações realizadas para cada par de entrada e de saída, foram obtidas as melhores configurações de rede com base na análise estatística do erro médio quadrático (MSE) mostradas na TAB. 5.3.

TABELA 5.3 - Configuração dos modelos de redes MLP.

Modelo	Neurônios			Algoritmo	MSE	Neurônios da camada de saída					
	Entrada	Oculto	Saída			CA	BA	BR	EC	NC	CS
1	13	7	6	LM	466,7	+	+	+	+	+	+
2	13	27	6	BP	636,5	+	+	+	+	+	+
3	13	14	5	LM	354,7	+	+	+	+	-	+
4	13	19	1	LM	251,5	+	-	-	-	-	-
5	13	10	1	LM	385,1	-	+	-	-	-	-
6	13	7	1	LM	208,4	-	-	+	-	-	-
7	13	7	1	LM	205,7	-	-	-	+	-	-
8	13	10	1	LM	911,3	-	-	-	-	+	-
9	13	9	1	LM	336,2	-	-	-	-	-	+
10	6	4	6	LM	509,1	+	+	+	+	+	+
11	6	13	1	LM	323,5	+	-	-	-	-	-
12	5	8	1	LM	386,4	-	+	-	-	-	-
13	6	6	1	LM	220,9	-	-	+	-	-	-
14	6	10	1	LM	188,6	-	-	-	+	-	-
15	6	4	1	LM	869,5	-	-	-	-	+	-
16	6	3	1	LM	382,0	-	-	-	-	-	+

+ simulado

- não simulado

De uma maneira geral, os valores de erro (MSE) obtidos nos 16 modelos de rede neural apresentaram uma ordem de grandeza semelhante. Com base nisso, utilizou-se o modelo 1 (FIG. 5.9) para exposição dos resultados subseqüentes.

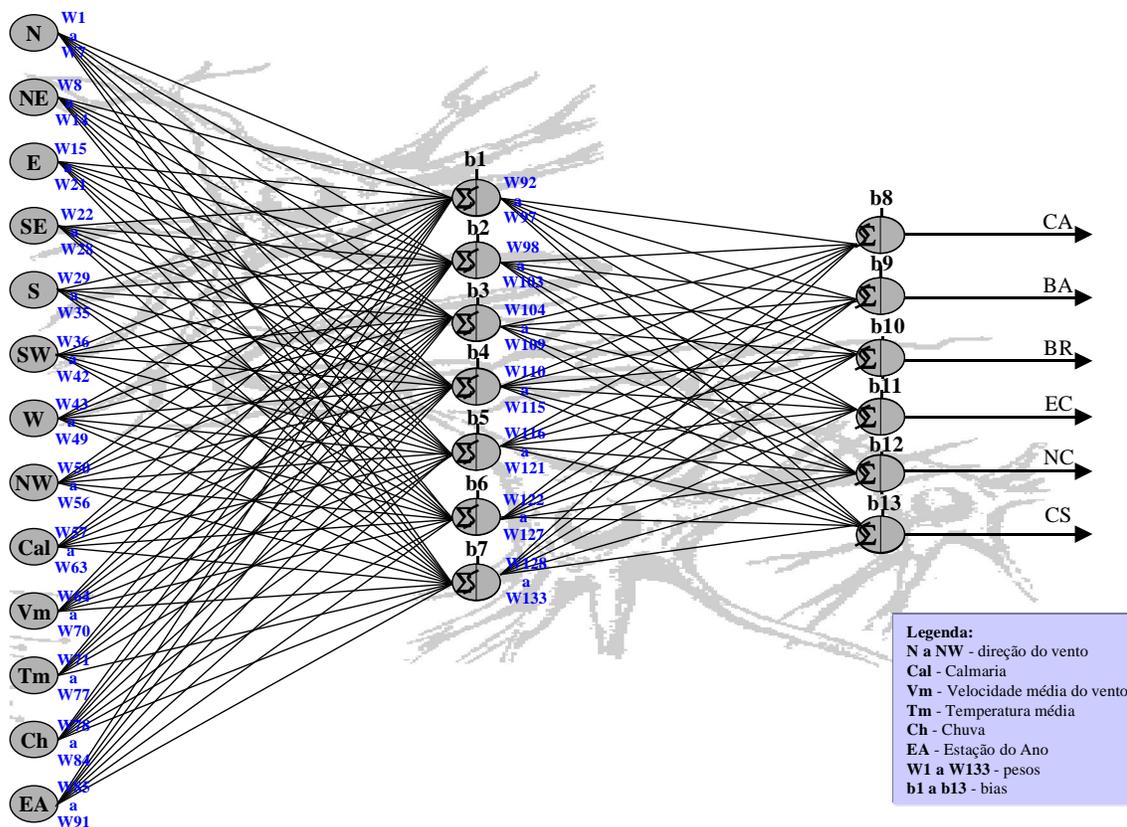


FIGURA 5.9 - Configuração do modelo 1.

As configurações obtidas apresentaram em sua maioria na camada oculta a metade dos neurônios da camada de entrada. Em apenas 2 casos (modelos 2 e 11), o valor foi mais que o dobro, conforme sugerido por KÓVACS, (2002).

Os modelos obtidos 1, 2 e 10, considerando 6 neurônios na camada de saída, apresentaram resultados próximos de erro médio quadrático (MSE), independente da quantidade de neurônios da camada de entrada e oculta.

Os modelos 4 a 9 e 11 a 16 foram criados, a fim de avaliar os resultados de cada estação de monitoramento da qualidade do ar. Os resultados de MSE obtidos de cada estação de monitoramento foram semelhantes com exceção do Novo Cruzeiro. O alto valor de erro encontrado nessa estação mostra que talvez os parâmetros de entrada utilizados na modelagem sejam insuficientes para explicar os valores de concentração de material particulado medidos. Esse fato fortifica também a idéia que os resultados dessa estação influenciam no resultado final, utilizando todas as estações.

A FIG. 5.10 apresenta a análise de agrupamentos dos 16 modelos em função do erro médio quadrático (MSE) obtido do *software statgraphics 5.0*.

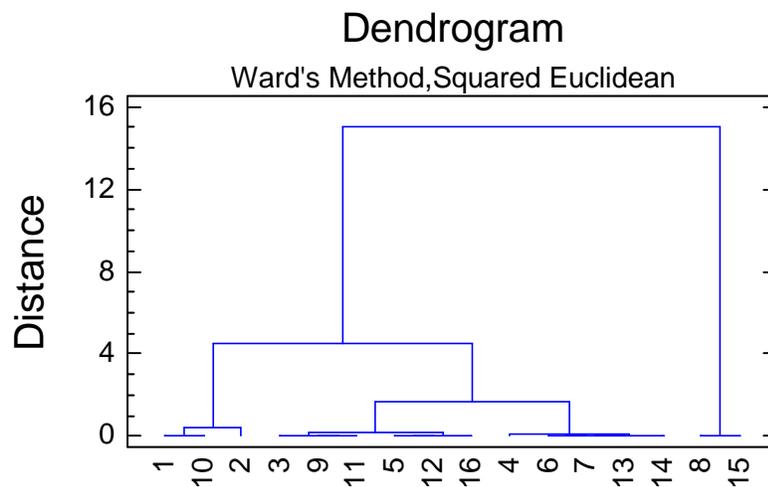


FIGURA 5.10 - Análise de agrupamentos dos modelos de ANN obtidos em função de MSE.

Conforme mostrado na FIG. 5.10, a análise de agrupamentos realizada dos modelos obtidos, em termos da análise do erro médio quadrático, indicou que os modelos 8 e 15 estão mais distantes em relação aos outros modelos, ou seja, eles são bastante diferentes dos outros modelos. Esses modelos (8 e 15) referem-se a modelagem para a estação do Novo Cruzeiro, mostrando mais uma vez como os resultados dela influenciam no resultado final, utilizando todas as estações.

5.2.4 Algoritmos de aprendizagem

Foi realizada a comparação entre os 2 algoritmos de aprendizagem utilizados, *Levenberg-Marquardt* e *Backpropagation*, conforme mostrada na TAB. 5.4.

TABELA 5.4 - Comparação entre os algoritmos de aprendizagem utilizados na modelagem.

Topologia	Levenberg-Marquardt		Backpropagation	
	t (s)	MSE	t (s)	MSE
13-07-6	6,1	525,8	49,5	1233,4
13-08-6	14,0	740,4	56,7	1231,1
13-09-6	20,5	508,9	62,8	1003,7
13-10-6	30,0	684,6	70,9	934,3
13-11-6	43,6	1032,3	78,1	816,8
13-12-6	52,7	797,1	85,4	987,1
13-13-6	78,4	1898,9	92,4	1536,1
13-14-6	95,2	944,9	99,1	878,8
13-15-6	105,4	483,5	106,3	1315,2
13-16-6	124,1	1142,8	113,3	1178,8
13-17-6	139,7	547,9	119,4	1140,4
13-18-6	156,9	1229,2	129,9	6938,1
13-19-6	173,8	581,5	138,7	744,3
13-20-6	202,1	878,8	147,0	1111,5
13-21-6	232,5	1192,1	152,7	1146,5
13-22-6	258,0	519,3	158,4	1276,6
13-23-6	289,2	658,8	166,2	1324
13-24-6	326,8	1050,4	173,0	934,7
13-25-6	349,6	496,7	179,6	1115,2
13-26-6	382,0	784,4	184,0	1169,8
13-27-6	414,9	1104,4	189,8	1595,0

Comparando-se os resultados dos algoritmos em termos do erro médio quadrático, verificou-se que utilizando o *Levenberg-Marquardt* na modelagem o erro é menor.

5.2.5 Treinamento

Em todas as simulações realizadas, durante a etapa de treinamento o valor do erro de treinamento utilizado foi igual a 0,0001 e o peso inicial (W) e *bias* inicial (b) foram determinados aleatoriamente. Foram mantidos também constantes a função de ativação

(tangente hiperbólica = $\frac{2}{(1 + \exp(-2x))} - 1$), e os valores de μ igual a 0,9 e η igual a 0,01 (estabelecidos *pele software Matlab R12*). A quantidade de ciclos foi igual a 100.

A FIG. 5.11 mostra o fim de um treinamento, usando o método de validação cruzada. Esse resultado foi obtido pelo *software Matlab R12*, referente a uma das 20 simulações realizadas na obtenção do modelo 1.

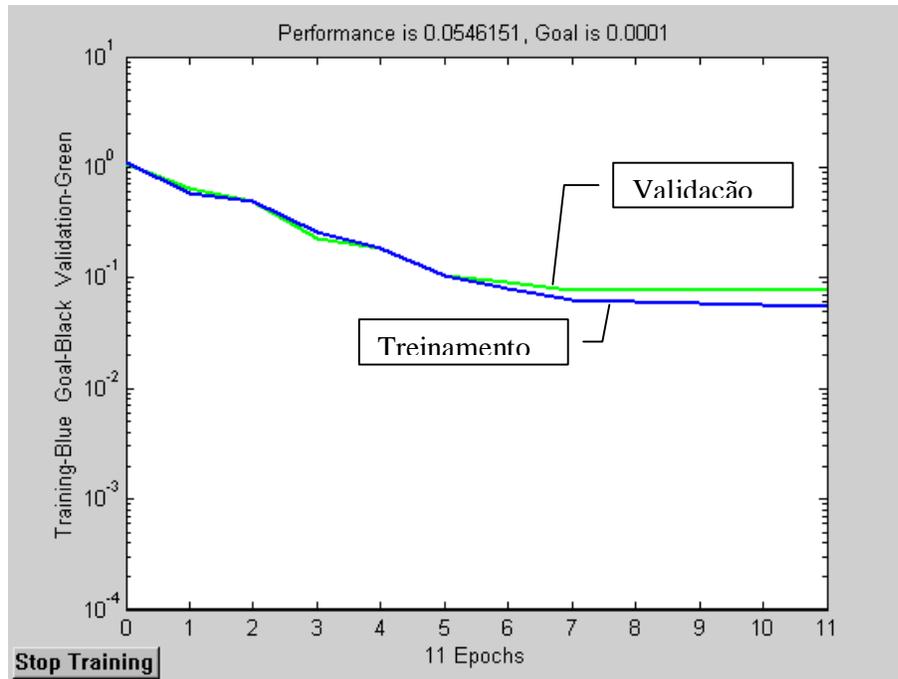


FIGURA 5.11 - Critério de parada por validação cruzada .

De acordo com a FIG. 5.11, foram necessários apenas 11 iterações para finalizar a etapa de treinamento. O erro de treinamento foi da ordem de 0,05, embora a meta estipulada fosse de 0,0001. Isso ocorreu porque de acordo com esse método, se o treinamento continuasse provavelmente iria ocorrer o problema de *overfitting* e a rede perderia sua capacidade de generalização.

Na FIG. 5.12, são apresentados os erros de treinamento obtidos para o conjunto com 80% dos dados para treinamento de cada uma das estações de monitoramento da qualidade do ar para o modelo 1.

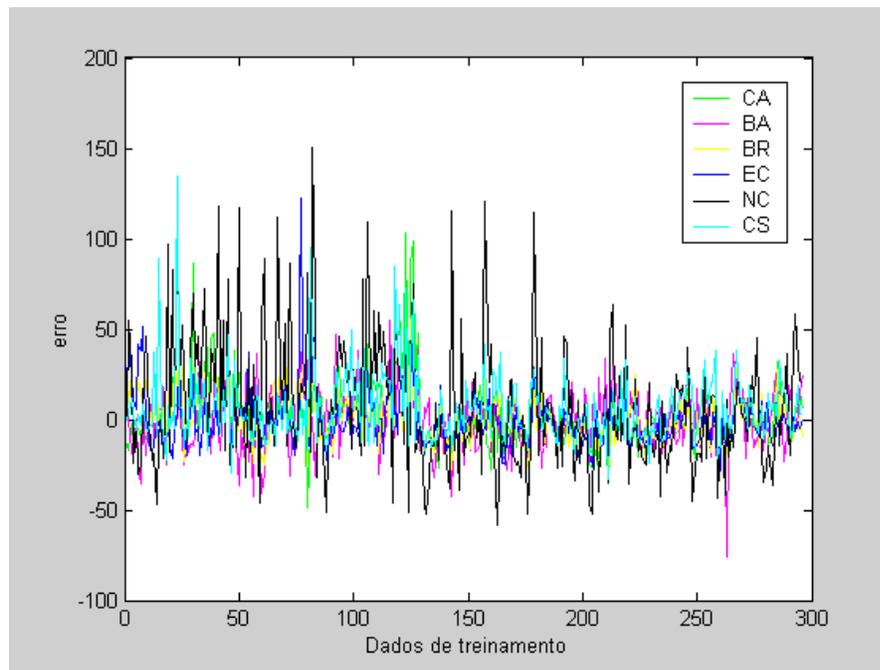


FIGURA 5.12 - Análise do erro de treinamento.

O erro obtido, que corresponde à diferença entre o valor real de concentração de PTS ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) e o valor estimado, permaneceu em torno de zero. Na estação do Cariru foi de $13 \mu\text{g}/\text{m}^3$, no Bairro da Águas, $14 \mu\text{g}/\text{m}^3$, no Bom Retiro, $11 \mu\text{g}/\text{m}^3$, no Escritório Central, $11 \mu\text{g}/\text{m}^3$, no Novo Cruzeiro, $27 \mu\text{g}/\text{m}^3$, e no Castelo, $14 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Os resultados da estação do Novo Cruzeiro (NC) apresentaram os maiores desvios, seguidos dos do Castelo (CS). Os valores máximos de desvio dessas últimas chegaram a atingir $150 \mu\text{g}/\text{m}^3$ e $134 \mu\text{g}/\text{m}^3$, respectivamente. Na etapa de treinamento, os valores estimados pelo modelo mantiveram-se dentro da faixa de desvio padrão obtido nas medições de concentração de material particulado em suspensão nas estações de monitoramento da qualidade do ar.

5.2.6 Análise de Performance (etapa de validação)

Na etapa de validação, os resultados de comparação entre os valores estimados e os reais são mostrados nas FIG. 5.13 a 5.18. Nessas FIG., é possível avaliar a tendência dos dados simulados.

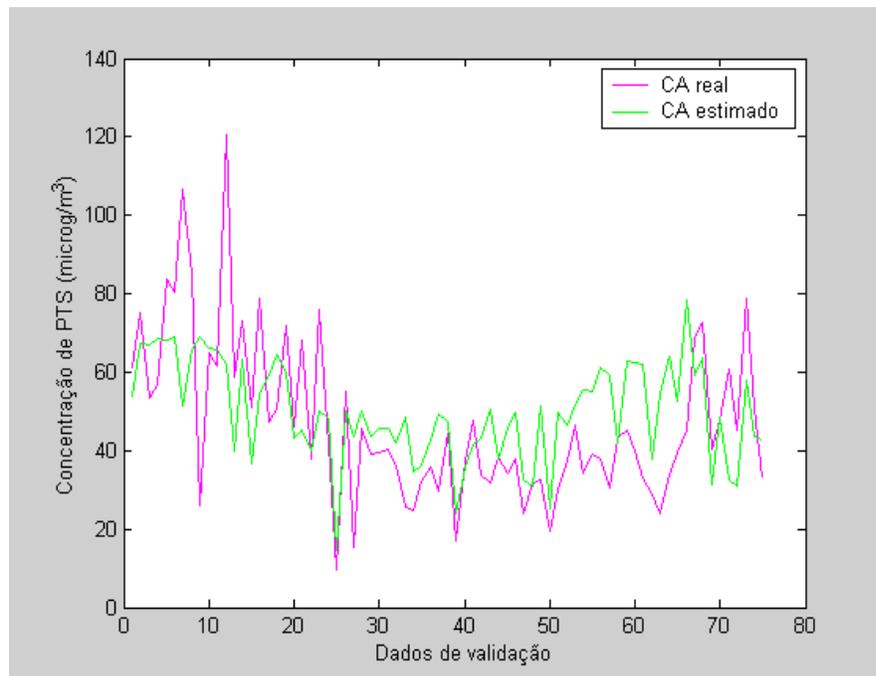


FIGURA 5.13 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Cariru (CA).

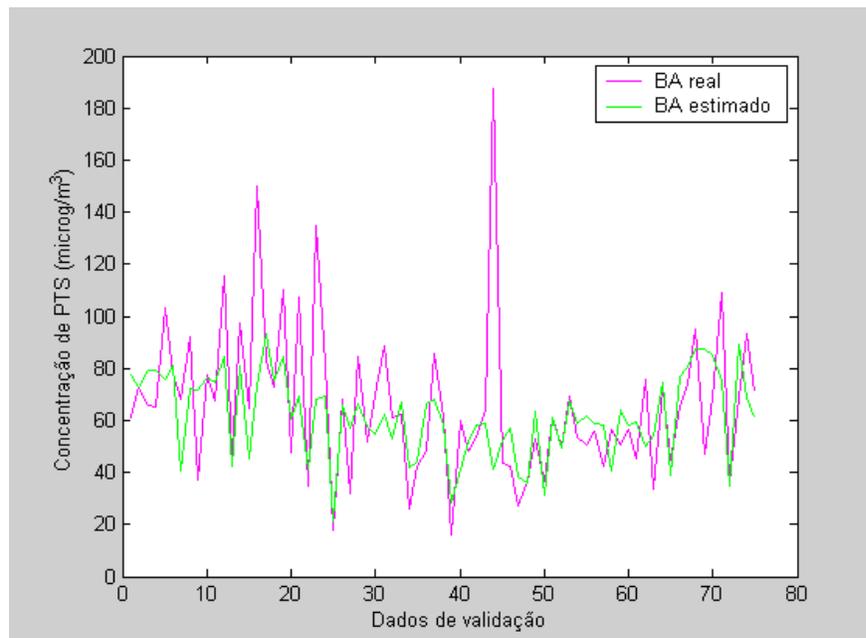


FIGURA 5.14 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Bairro das Águas (BA).

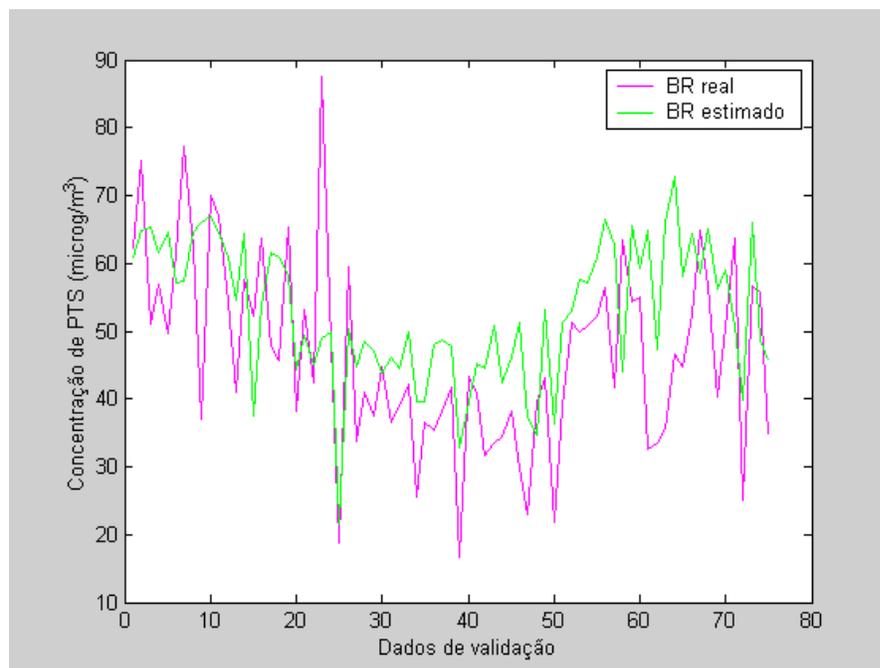


FIGURA 5.15 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Bom Retiro (BR).

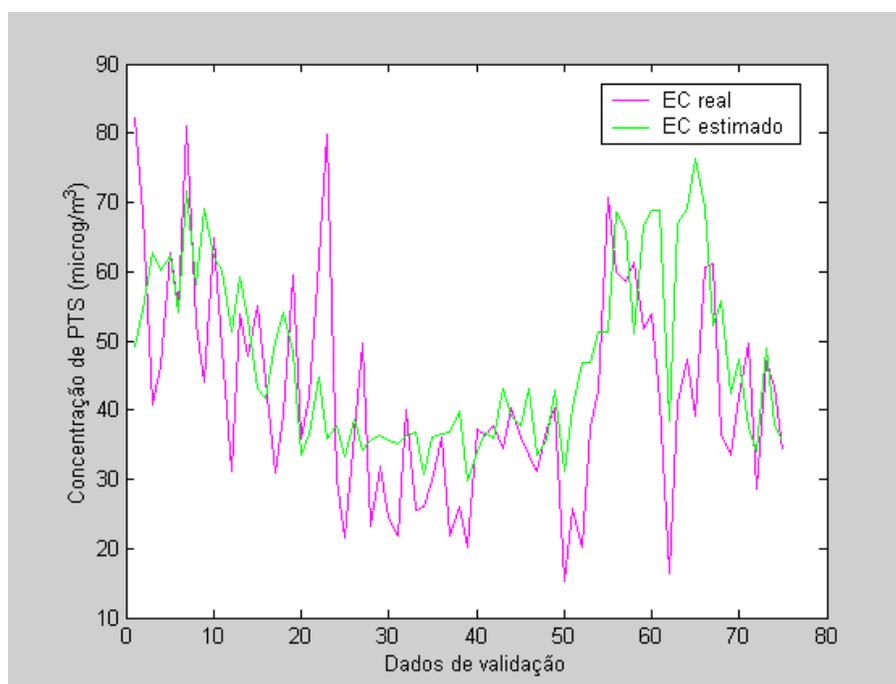


FIGURA 5.16 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Escritório Central (EC).

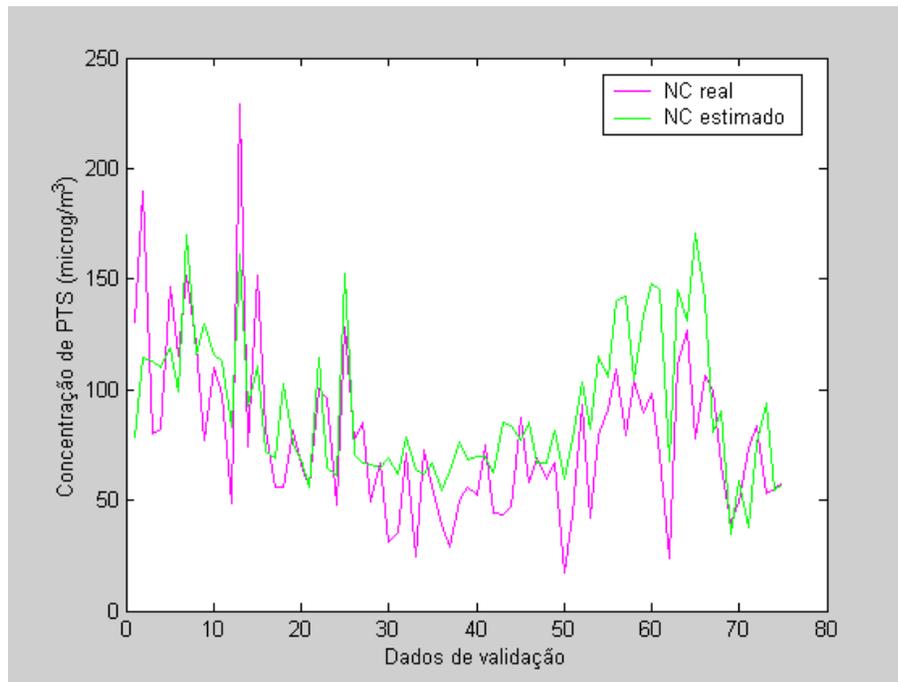


FIGURA 5.17 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Novo Cruzeiro (NC).

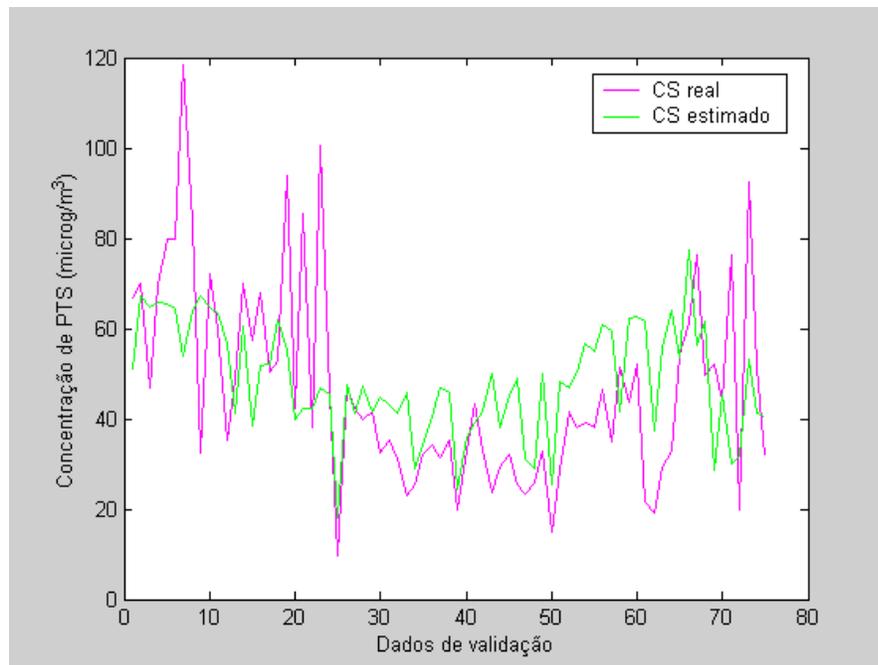


FIGURA 5.18 - Avaliação de tendência dos valores estimados obtidos na estação do Castelo (CS).

De uma maneira geral, em todas as estações verificou-se que os valores estimados apresentaram tendência de subida e descida semelhante aos valores reais de material particulado. Prova disso, são os valores de desvio (valor de concentração real – valor de concentração estimado) (FIG. 5.19), erro percentual (TAB. 5.5) e médio quadrático (MSE) (TAB. 5.6) obtidos.

Na FIG. 5.19, é mostrada a análise de desvio obtido para o conjunto de 20% dos dados de cada uma das 6 estações de monitoramento da qualidade do ar em torno da média igual a 0.

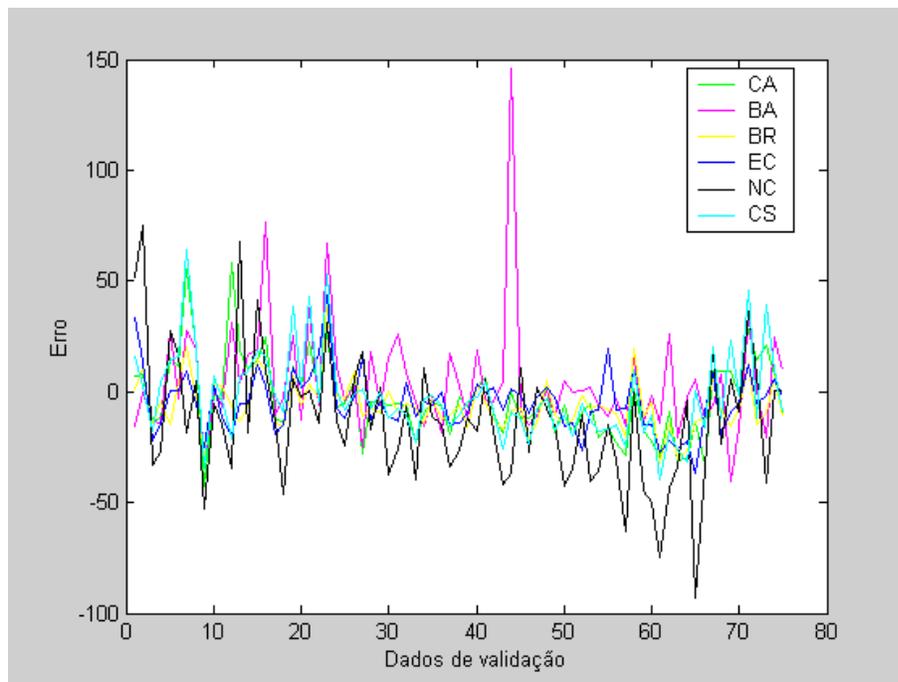


FIGURA 5.19 - Análise do erro de validação.

Os dados de validação de cada uma das estações de monitoramento da qualidade do ar apresentaram um desvio em torno de zero. O desvio médio obtido na estação do Cariru foi $14 \mu\text{g}/\text{m}^3$, no Bairro das Águas $16 \mu\text{g}/\text{m}^3$, no Bom Retiro, $11 \mu\text{g}/\text{m}^3$, no Escritório Central, $11 \mu\text{g}/\text{m}^3$, no Novo Cruzeiro, $25 \mu\text{g}/\text{m}^3$ e no Castelo, $15 \mu\text{g}/\text{m}^3$: A estação do Novo Cruzeiro foi a que apresentou o maior desvio. Em todos os pontos de monitoramento da qualidade do ar os valores estimados ficaram dentro da faixa de desvio padrão obtido nas medições reais de material particulado em suspensão.

Em termos percentuais, considerando o modelo 1 obtido, o valor do erro cometido nos 6 pontos de monitoramento da qualidade do ar pode ser visto na TAB. 5.5.

TABELA 5.5 - Valor de erro percentual cometido na modelagem nos 6 pontos de monitoramento da qualidade do ar.

Estações de monitoramento	Erro (%)
CA	35
BA	24
BR	27
EC	31
NC	42
CS	37

Em termos percentuais, as estações do Novo Cruzeiro e o Castelo tiveram resultados de erros de modelagem maiores do que os outros pontos de monitoramento da qualidade do ar.

Os resultados de comparação entre o valor real e o valor estimado por meio da análise do erro médio quadrático obtido em cada uma das estações de monitoramento da qualidade do ar são mostrados na TAB. 5.6.

TABELA 5.6 - Análise de MSE obtido nas estações de monitoramento.

Estações de monitoramento	MSE
BA	671
CA	335
CS	390
EC	203
NC	1027
BR	174
Total (média)	467

Os valores de MSE das estações do Novo Cruzeiro e Bairro das Águas apresentaram os piores resultados. Particularmente, o Bairro das Águas apresentou um resultado ruim, um valor de MSE de 671. Isto ocorreu porque quando se optou por esse modelo, foi avaliado o valor médio de MSE obtido das 6 estações de monitoramento em conjunto. Das 20 simulações realizadas, verificou-se que esse foi o menor valor. Como pode ser visto na TAB. 5.3, o valor

de MSE obtido no Bairro das Águas, considerando somente uma saída foi igual 386,4. Já o Novo Cruzeiro apresentou resultados elevados de MSE em todas as simulações.

Em síntese, a análise de erro indicou que o modelo conseguiu melhores resultados com as estações do Bom Retiro, Bairro das Águas e Cariru do que com as outras 3 estações de monitoramento.

Para avaliar a influência dos variáveis de entrada sobre as de saída realizou-se a análise de agrupamentos conforme mostrado na FIG. 5.20. Assim, pela análise da distância entre as variáveis, conforme mostrado nessa FIG., é possível ver quais foram as variáveis de entrada que apresentaram maior influência sobre um determinado grupo dos dados de saída.

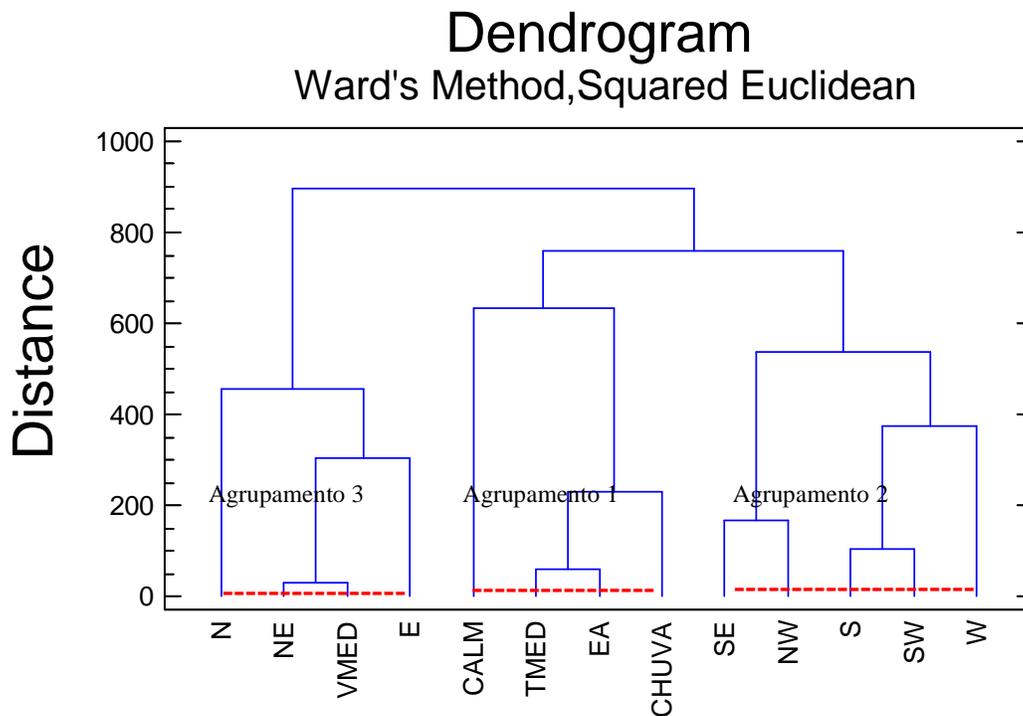


FIGURA 5.20 - Análise de agrupamentos entre as variáveis de entrada.

De acordo com a FIG. 5.20, aplicando o método de *Ward*, foram obtidos 3 agrupamentos, conforme assinalado (linha tracejada em vermelho) nessa FIG. O agrupamento 1, que reuniu 50% dos dados de saída, associou as variáveis de entrada calmaria (CAL), temperatura média (TM), as estações do ano (EA) e chuva (CH). Em outras palavras, 50 % dos valores de concentração de material particulado em suspensão foram próximos entre si devido a forte

influência dessas variáveis de entrada. O agrupamento 2 (cerca de 19% dos dados de saída), representa as direções de ventos sudeste (SE), sul (S), noroeste (NW), sudoeste (SW) e oeste (W)). Assim, a ocorrência de valores de concentração de material particulado foi devido a influência principalmente dessas variáveis de entrada. O agrupamento 3, relaciona os parâmetros de direção dos ventos nordeste (NE), Norte (N), leste (E) e velocidade média (VM) e corresponde a 24% dos dados de saída.

Na TAB. 5.7 são apresentadas as características de cada agrupamento em termos da estatística básica de média (med), mínimo (min), máximo (max) e desvio padrão (dp) dos parâmetros de entrada avaliados. No caso da variável temporal, foi avaliada a predominância de cada estação do ano, inverno (I) e verão (V).

TABELA 5.7 - Estatística básica dos agrupamentos obtidos.

Parâmetro Entrada	Agrupamento 1				Agrupamento 2				Agrupamento 3			
	min	med	dp	max	min	med	dp	max	min	med	dp	max
N	0	1,7	2,9	14	0	0,3	0,7	2	0	1,2	1,8	5
NE	0	3,7	3,6	14	0	1,8	2,9	10	0	10,2	6,5	22
E	0	2,1	2,0	7	0	2,9	3,7	11	0	7,9	6,6	24
SE	0	0,5	0,9	3	0	1,9	2,8	8	0	0,6	1,0	3
S	0	0,9	1,6	6	0	5,9	4,0	15	0	0,4	1,4	6
SW	0	0,3	0,7	2,0	0	3,4	3,6	11	0	0,1	0,2	1
W	0	0,4	0,8	3	0	1,1	3,7	14	0	0,3	0,7	3
NW	0	0	0	0	0	0,3	0,8	3	0	0,2	0,4	1
CAL	5	14,6	4,8	24	0	6,5	5	15	0	3,3	2,5	7
VM	0	0,6	0,4	1,8	0,5	1,1	0,4	1,8	1,1	1,7	0,3	2,1
TM	17,3	21,8	2,3	26,3	17,6	21,7	2,4	25,3	20,4	24,9	1,8	28,0
CH	0	2,8	6,0	23,4	0	1,6	2,6	7	0	2,6	4,4	14,1
EA	V-I				I				V			

O agrupamento 1 apresenta o seguinte cenário: direções de ventos (N, NE, E) dominantes, velocidades inferiores a 1 m/s, ou seja com calmaria elevada, temperatura ambiente média em torno de 21°C, chuvas torrenciais mais frequentes e ocorrência em praticamente todo o ano, compreendendo as duas estações do ano.

No agrupamento 2, as direções de ventos (SE, S, NW, SW, W) são dominantes, velocidades mais elevadas que o agrupamento 1, temperatura ambiente média também em torno de 21°C, chuvas mais escassas e predominância da estação de inverno.

O agrupamento 3 caracterizou-se por apresentar direções de ventos (N, NE, E) dominantes, com rajadas de ventos de 2,1 m/s, predomínio da estação verão, chuvas mais freqüentes e temperaturas médias mais elevadas.

Nas FIG. 5.21 a 5.27, é mostrada a comparação entre os valores estimados e os reais em cada uma das estações de monitoramento da qualidade do ar, mostrando a influência dos parâmetros de entrada utilizados na modelagem e a avaliação dos erros tipo I (falso negativo) e erro tipo II (falso positivo) cometidos.

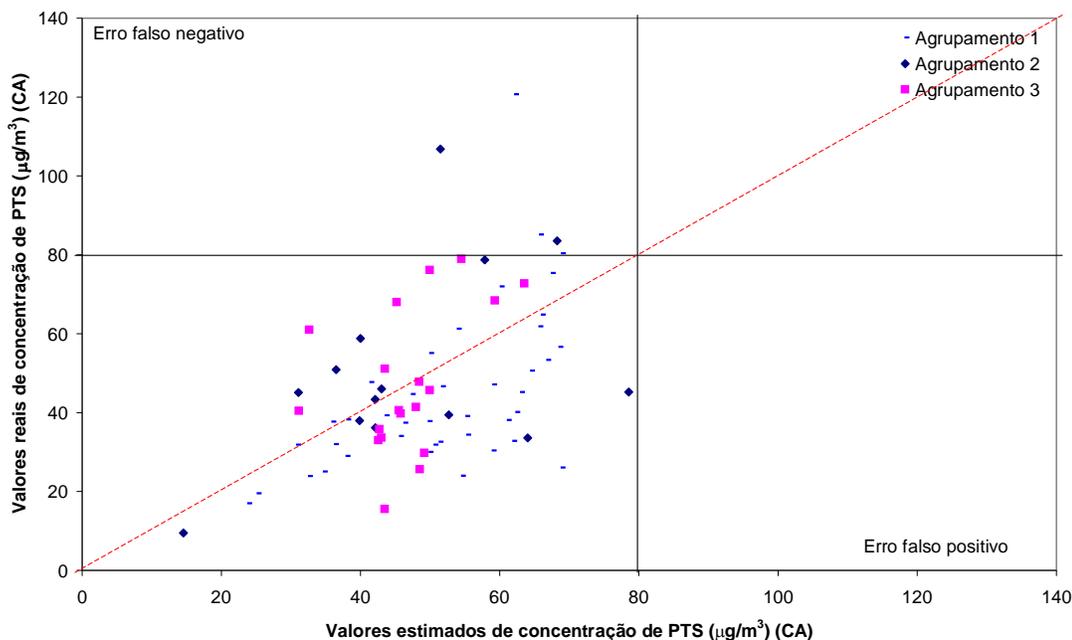


FIGURA 5.21 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Cariru (CA).

Na FIG. 5.21, é mostrada a comparação entre os valores reais e valores estimados na estação de monitoramento do bairro Cariru. De acordo com a análise de quartil, 63 % dos valores obtidos na modelagem foram superestimados, ou seja, foram superiores ao valor real. As variáveis de entrada que contribuíram mais para a obtenção desses valores foram aquelas do agrupamento 1. Para esse local, foram apenas cometidos erro tipo I. Nesse caso, o modelo previu valores inferiores ao valor crítico (padrão ambiental da legislação de $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ definido

pela resolução CONAMA nº 3), quando na verdade eram superiores. Apesar disso, isso representou menos de 1 % dos dados de validação.

Na FIG. 5.22, é mostrada a comparação entre os valores reais e valores estimados na estação de monitoramento do Bairro das Águas. De acordo com a análise de quartil, houveram uma leve predominância de valores superestimados (52% dos valores preditos). Estes valores superestimados ocorreram em condições meteorológicas sugeridas pelo agrupamento 1.

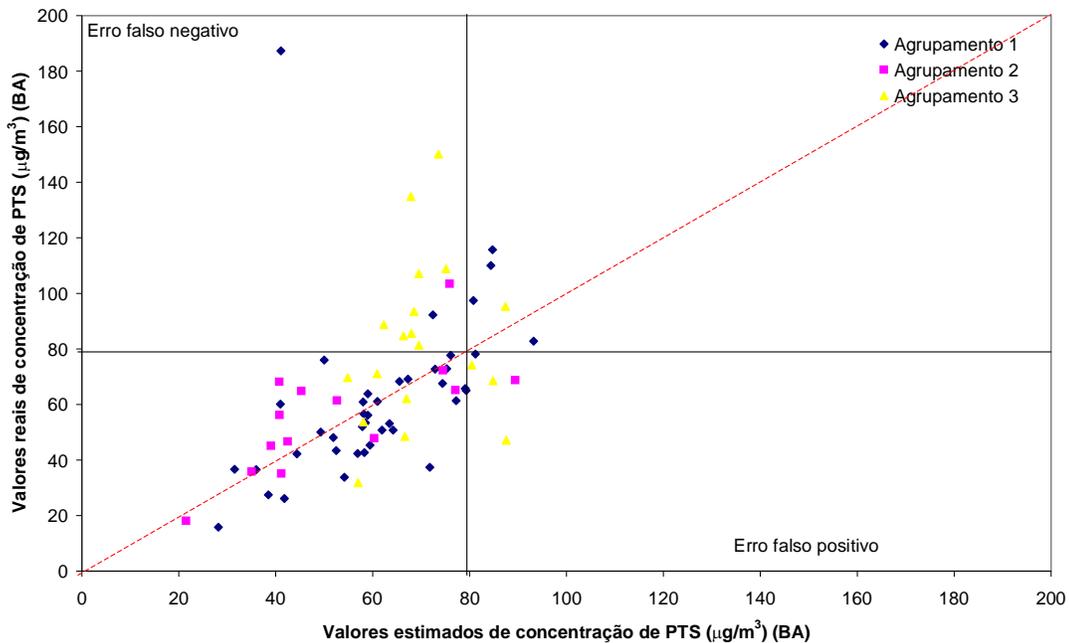


FIGURA 5.22 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Bairro das Águas (BA).

Para esse local, foram cometidos os erros tipo I e tipo II, cerca de 20 % dos dados de validação. Para o erro tipo I, que foi dominante, verificou-se que os dados de validação apresentavam maior influência do agrupamento 3. Nesse caso, esse erro ocorreu mais durante o período da estação de verão, sob influência das direções (N, NE, E) com velocidade de ventos de até 2,1 m/s. Como essa estação está a sotavento das fontes emissoras provenientes da siderurgia local e, sob essas condições meteorológicas, caso tenha ocorrido um aumento das emissões de material particulado, provavelmente o modelo não foi capaz de detectar e, por isso, a modelagem apresentou um valor menor quando deveria ter sido maior.

De acordo com a FIG. 5.23, os valores estimados pelo modelo foram maiores que o valor real na maioria das vezes. Foi verificado também apenas um caso de erro tipo I. O bairro Bom Retiro está também localizado em região que sofre somente influência das emissões atmosféricas provenientes da siderúrgica local.

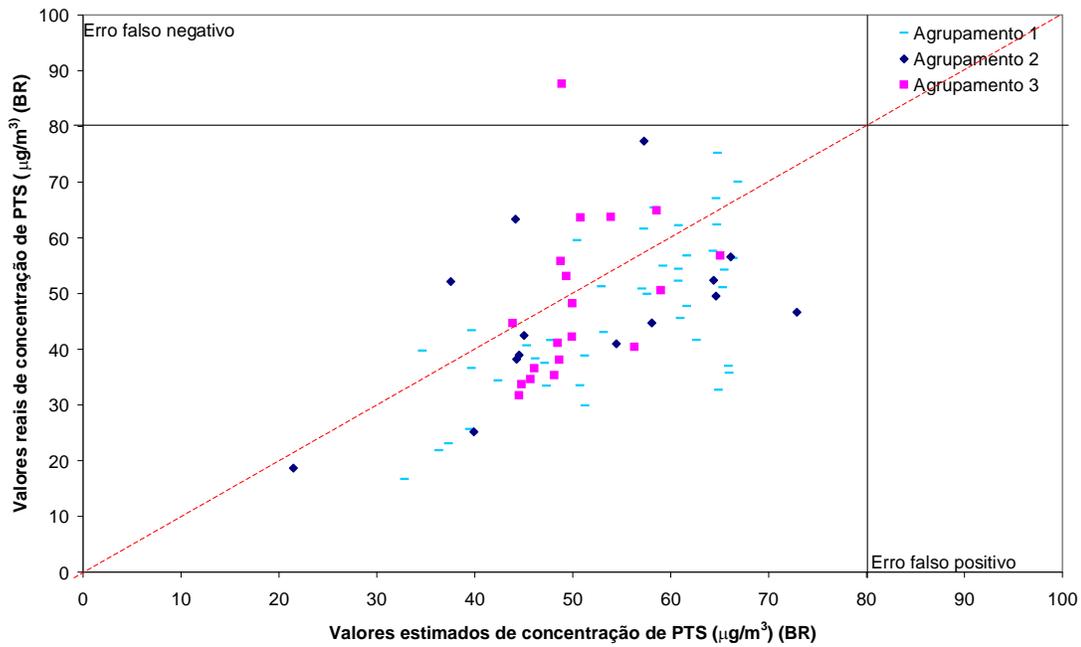


FIGURA 5.23 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Bom Retiro (BR).

Os resultados estimados na modelagem para as estações do bairro Cariru, das Águas e Bom Retiro foram superiores aos valores reais de concentração de material particulado obtidos nesses locais. No entanto, a diferença entre eles é pequena conforme constatado pela análise de desvio em relação ao valor de desvio padrão obtido nas medições de concentração de material particulado em suspensão. Portanto, a superestimativa obtida pela modelagem não é significativa pois se encontra dentro da margem de erro de medição de concentração do poluente.

No bairro Ferroviários na estação do Escritório Central, verificou-se que os valores obtidos na modelagem foram em sua maioria superestimados (FIG. 5.24). Nesse caso, as condições meteorológicas dominantes foram ventos de baixa velocidade (elevada calma) e direções

norte, nordeste, leste dominantes em relação às outras. Os erros tipo I e tipo II não ocorreram praticamente.

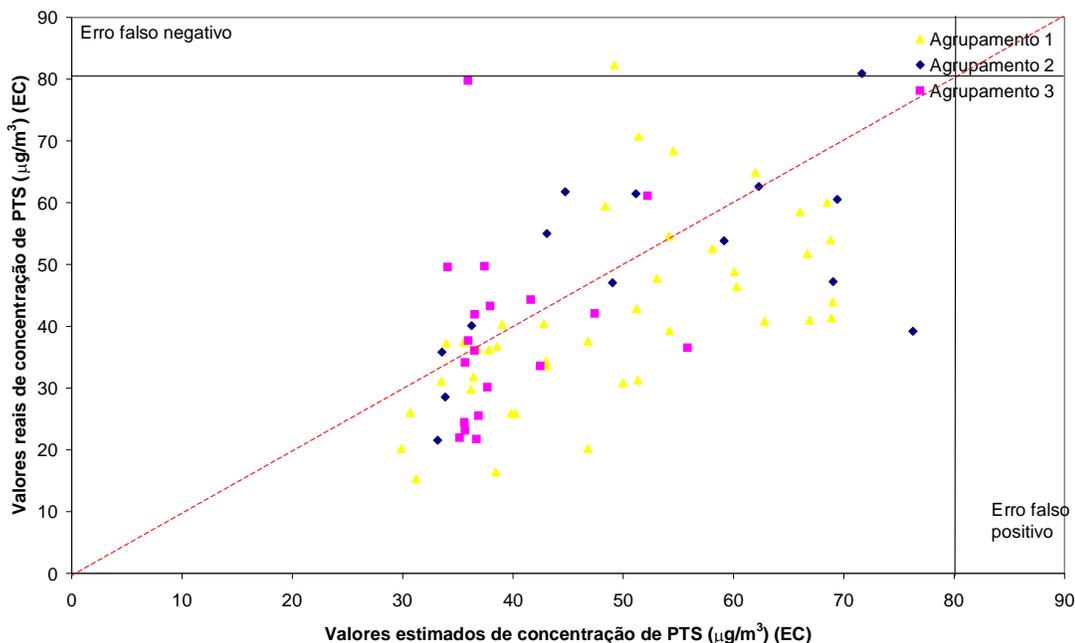


FIGURA 5.24 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Escritório Central (EC).

Os valores simulados na estação do Novo Cruzeiro foram em sua maioria também superestimados (FIG. 5.25). Esses resultados foram obtidos em condições meteorológicas similares às da estação do Escritório Central. No entanto, os valores preditos nesse local estão bem mais dispersos da linha central do que no Escritório Central. Os erros tipo II foram mais frequentes que os erros tipo I e representaram menos de 15% dos dados de validação.

A dispersão dos valores estimados no bairro Novo Cruzeiro foi maior em condições meteorológicas obtidas segundo o agrupamento 2. Nesse agrupamento predominam ventos vindos de outras direções que não as típicas da região de Ipatinga.

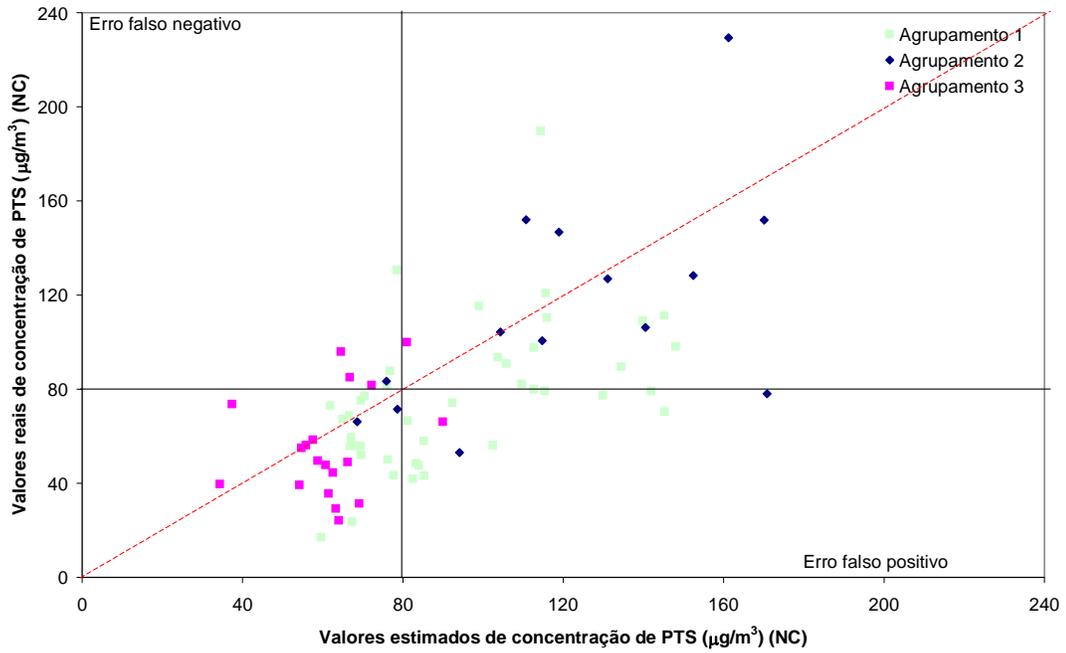


FIGURA 5.25 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Novo Cruzeiro (NC).

Na estação de monitoramento localizada no bairro Castelo, os valores obtidos pelo modelo de redes neurais foram na sua maioria superestimados (FIG. 5.26). Foram cometidos somente erros tipo I, mas representando pouco mais que 5% dos dados de validação.

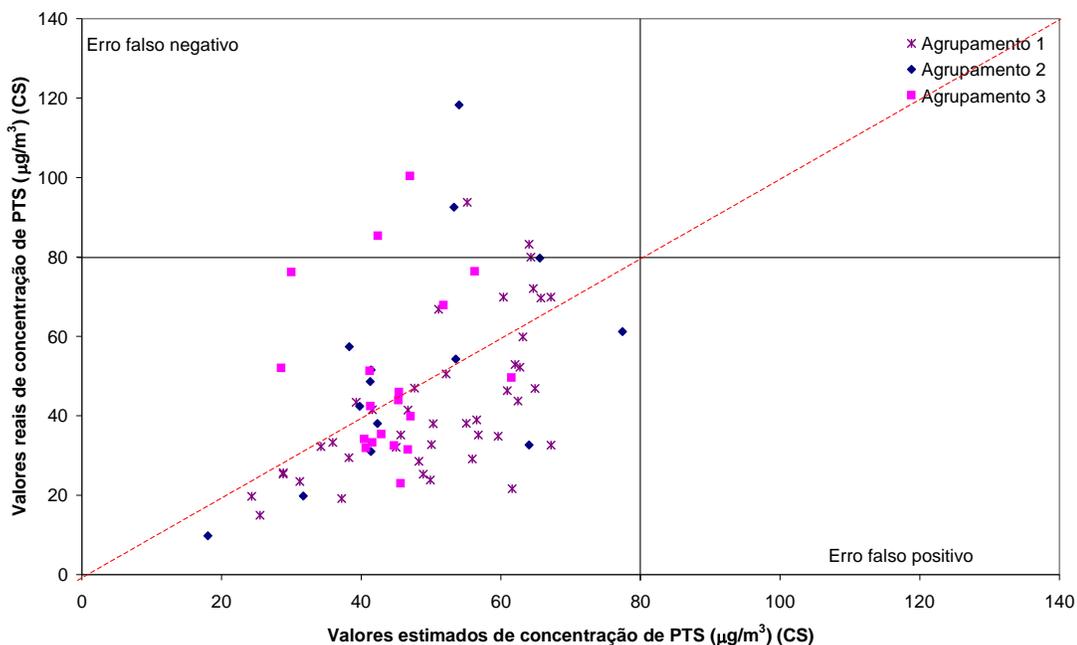


FIGURA 5.26 - Análise de comparação entre os valores reais e estimados obtidos na estação do Castelo (CS).

O fato do resultado na estação do Novo Cruzeiro ter sido pior em relação aos outros pode ser explicado com base na localização dele. A estação do Novo Cruzeiro tem, ao seu lado, uma rodovia de elevado fluxo de veículos. Essas fontes móveis podem se constituir em outra fonte emissora de material particulado e também serem responsáveis pela ressuspensão de poeira presente nessa rodovia. Esse incremento de poluição não foi utilizado na modelagem. As duas últimas estações assim como ocorreu os resultados de modelagem das outras estações tiveram grande parte superestimados. No entanto, esses valores permaneceram dentro da faixa de erro obtido nas medições de concentração de PTS medidos nesses locais.

5.3 Comparação entre os modelos ANN e o de dispersão ISCST3

Para análise de comparação entre os modelos (Redes Neurais e dispersão *ISCST3*), utilizou-se o modelo 1 de redes neurais obtido.

Os resultados obtidos das análises realizadas são mostrados na TAB. 5.8.

TABELA 5.8 - Análise estatística de comparação entre os modelos matemáticos.

Estações de monitoramento da qualidade do ar	Análise estatística							
	FB		IA		R		MSE	
	ISCST3	ANN	ISCST3	ANN	ISCST3	ANN	ISCST3	ANN
CA	-0,29	0,06	0,61	0,66	0,37	0,48	1753,86	334,79
BA	-0,06	-0,07	0,68	0,62	0,05	0,47	2944,57	671,00
BR	0,42	0,12	0,60	0,69	1,18	0,56	6124,87	173,68
EC	-0,61	0,11	0,81	0,70	1,96	0,54	1652,21	202,97
NC	-0,82	0,15	0,85	0,76	0,55	0,65	4003,12	1027,18
CS	0,29	0,04	0,29	0,61	0,56	0,44	14616,33	390,40

Pela análise estatística de *Fractional bias* (FB) as estações de monitoramento do Novo Cruzeiro, Bom Retiro e Escritório Central foram as que apresentaram os piores resultados estimados de concentração de material particulado em suspensão, tanto para o modelo de rede neural quanto para o de dispersão. Já pela análise do índice de conformidade (IA), os resultados estimados na estação do Castelo foram os piores nos 2 modelos avaliados. A análise dos valores de FB e IA indica que a modelagem por redes neurais artificiais apresenta menor erro que a por dispersão. A comparação entre os valores medidos e estimados pelo coeficiente de variação R e também pela análise do erro quadrático médio (MSE) obtidos em cada uma das estações de monitoramento da qualidade do ar foram também melhores utilizando o modelo de rede neural artificial (ANN) do que o modelo de dispersão *ISCST3*.

Assim, de acordo com os valores obtidos, o modelo de rede neural artificial é o que mais se aproxima do modelo perfeito. É importante ressaltar que no modelo de dispersão não foram utilizados valores de *Background* com os quais segundo MITKIEWICZ (2002), os resultados obtidos melhoram bastante.

6 CONCLUSÕES

Este estudo mostrou que por meio do modelo de redes neurais artificiais foi possível estimar as concentrações de material particulado em suspensão em 6 diferentes locais na cidade de Ipatinga.

A estimativa foi obtida considerando os parâmetros meteorológicos: direção dos ventos, velocidade dos ventos (m/s), chuva (mm), temperatura ambiente ($^{\circ}\text{C}$), calmaria (velocidades de ventos inferiores a 1 m/s) e os temporais como as estações sazonais do ano de verão e inverno, totalizando 13 variáveis de entrada. A escolha por esses parâmetros deveu-se a conhecimento adquirido em literatura.

Foram avaliadas diversas configurações de rede neural artificial. Dois diferentes algoritmos de treinamento foram também avaliados. O número de neurônios na camada intermediária foi equivalente a metade usada na camada de entrada. A comparação entre os algoritmos de aprendizagem *Levenberg-Marquardt* e *Backpropagation* indicou o primeiro como sendo o melhor. De uma maneira geral, verificou-se que os valores de erro (MSE) obtidos, independente da topologia testada, apresentaram uma ordem de grandeza semelhante. Com base nesses resultados, a topologia de rede ideal obtida foi 13-7-6.

A comparação entre os valores reais de concentração de material particulado em suspensão e os valores estimados foi realizada. Avaliaram-se a tendência dos resultados estimados em relação aos valores reais de material particulado e a presença dos erros tipo I (falso negativo) e tipo II (falso positivo).

Os valores estimados foram também mais próximos aos valores reais nas estações de monitoramento Bom Retiro, Bairro das Águas e Cariru do que nas estações do Novo Cruzeiro, Castelo e Escritório Central. Em termos da análise de erro percentual, os resultados obtidos na estação do bairro Novo Cruzeiro foram os piores enquanto no Bairro das Águas, os melhores. O alto valor de erro obtido (42%) na modelagem realizada no bairro Novo Cruzeiro mostra que talvez os parâmetros de entrada utilizados na modelagem sejam insuficientes para explicar os valores de concentração de material particulado estimados. Este resultado também foi obtido no estudo realizado por MITCKIEWICZ (2002), usando o modelo de dispersão. A estação de monitoramento do Novo Cruzeiro apresenta também uma particularidade que deve

ter contribuído para o elevado valor de erro. Essa estação tem, ao seu lado, uma rodovia de elevado fluxo de veículos. Essas fontes móveis podem se constituir em outra fonte emissora de material particulado e também ser responsáveis pela ressuspensão de poeira presente nessa rodovia. Esse incremento de poluição não foi utilizado na modelagem. Os resultados obtidos na estação de monitoramento no Bairro das Águas (24%) foram os melhores porque esse bairro está situado na direção preferencial dos ventos da região de Ipatinga e, portanto, se as fontes emissoras emitiram em regime normal, os valores simulados tendem a ser os mais próximos dos valores reais.

Os erros tipo I e tipo II obtidos na modelagem em todas as estações de monitoramento da qualidade do ar foram pouco representativos. Os erros tipo II somente ocorreram na estação de monitoramento do Novo Cruzeiro e o erro tipo I foi mais freqüente na estação de monitoramento do Bairro das Águas. A explicação para esse fato pode ser dada com base na localização dessas estações. A estação do Novo Cruzeiro está localizada num local que sofre influências de outras fontes emissoras que não a siderúrgica situada na região. Por isso, elevados valores são registrados nesse local. Por outro lado, o Bairro das Águas, pela sua localização a sotavento, recebe exclusivamente as emissões provenientes da fábrica local. Portanto, qualquer alteração nos valores de emissão das fontes emissoras provoca mudanças nos valores de concentração desse poluente obtidos nesse local. Como a variável emissão não foi inserida na modelagem, a sua variabilidade não pode ser visualizada nessa modelagem e o erro foi registrado.

A comparação entre o modelo de dispersão *ISCST3* e o de rede neural artificial também foi realizada. A análise estatística de *Fractional bias* (FB) mostrou que as estações de monitoramento do Novo Cruzeiro, Bom Retiro e Escritório Central foram as que apresentaram os piores resultados estimados de concentração de material particulado em suspensão, tanto para o modelo de rede neural quanto para o de dispersão. A análise dos valores de FB e IA indica que a modelagem por redes neurais artificiais apresenta menor erro que a por dispersão. A análise do índice de conformidade (IA) indicou que os resultados estimados na estação do Castelo foram os piores nos 2 modelos avaliados. A comparação entre os valores medidos e estimados pelo coeficiente de correlação linear R e também pela análise do erro médio quadrático (MSE) obtidos em cada uma das estações de monitoramento da qualidade do ar foram melhores utilizando o modelo de rede neural artificial (ANN) do que o modelo de dispersão *ISCST3*.

7 RECOMENDAÇÕES

O banco de dados utilizado na modelagem desenvolvida neste estudo foi muito restrito. Embora o período histórico contemplado tenha sido relevante, os dados foram coletados semanalmente. A modelagem com os dados de entrada e saída horários seria o ideal, pois, dessa forma, o banco de dados gerados seria maior. Para isso, seria necessária a implantação de uma rede de monitoramento contínuo de material particulado da qualidade do ar associada a uma estação meteorológica também contínua.

Os resultados obtidos na modelagem de redes neurais artificiais realizada foram melhores que os obtidos no modelo de dispersão. Diante disso, seria interessante o desenvolvimento de estudo similar, contemplando outros poluentes atmosféricos.

Em termos de modelagem poder-se-ia vislumbrar a introdução nos dados de entrada da variável emissão de fontes emissoras. Assim, valores extremos de concentração poderiam ser modelados em virtude do aumento do valor de emissão. Para isso, no entanto, seria necessária a instalação de monitoramento contínuo de emissão de material particulado (opacímetros) das fontes emissoras. A utilização de variáveis temporais como seno e cosseno do dia do ano também poderiam ser avaliados. Elas viriam a substituir a variável estação do ano. Uma outra sugestão seria a utilização de outros tipos de redes neurais artificiais na modelagem da dispersão dos poluentes atmosféricos. As redes tipo RBF têm sido utilizadas para este fim e, portanto, poderiam ser uma boa opção.

A ferramenta estatística utilizada na avaliação de erro da modelagem foi o erro médio quadrático (MSE). Para o modelo 1 obtido, foi analisado o valor médio dos erros obtidos das 6 estações das 20 simulações realizadas e escolheu-se o menor. No entanto, verificou-se que a estação do Bairro das Águas apresentou um valor de MSE elevado. Assim, poder-se-iam adotar, numa próxima avaliação, valores médios de MSE um pouco mais altos, de forma a atenuar os resultados obtidos de cada estação.

A modelagem realizada a partir dos dados obtidos na estação Novo Cruzeiro foi a que apresentou os piores resultados. Acredita-se que sua localização, próxima a uma rodovia de elevado fluxo de veículos, seja a responsável pelos altos valores encontrados. A mudança do local de monitoramento nesse bairro, livre da influência das emissões atmosféricas do tráfego da rodovia (emissões de veículos e ressuspensão da poeira), seria uma opção. Uma outra

abordagem seria confirmar se a poluição caracterizada nos filtros recolhidos nessa estação é de fato proveniente de outras fontes que não da Siderúrgica localizada nas proximidades.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BASHEER, I. A.; HAJMEER, M. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application. *JouANNI of Microbiological Methods, USA*, v. 43, p. 3-31, 2000.
- BAUM, E., HAUSSLER, D., 1989. What size net gives valid generalization? *Neural Computation* 1, 151-160. Apud BASHEER, I. A.; HAJMEER, M. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application. *JouANNI of Microbiological Methods, USA*, v. 43, p. 3-31, 2000.
- CORANI, G. Air quality prediction in Milan: feed-forward neural networks, pruned neural networks and lazy learning. *Ecological Modelling, Italy*, v. 185, p. 513-529, 2005.
- DEMUTH, H., BEALE, M., Neural networks toolbox user's guide – For use with matlab, The Mathworks, Inc., vol. 3, 1997, 680p. Apud OLIVEIRA, E.D. Desenvolvimento de metodologia e de modelos para variáveis de performance em caldeiras de recuperação via redes neurais artificiais. Belo Horizonte: Escola de Engenharia da UFMG, 2003. 101p. (Dissertação, Mestrado em Engenharia Química).
- DONALDSON, K. BESWICK, P.H., GILMOUR, P.S., 1996. Free radical activity associated with the surface of particles. *Toxicol. Lett.* 88, 293-298. Apud SPURNY, K.R. On the physics, chemistry and toxicology of ultrafine anthropogenic, atmospheric aerosols (UAAA): new advances. *Toxicology Letters*, vol. 96, 97, p. 253-261, 1998.
- DOWLA, F.U., ROGERS, L.L., 1995. Solving problems in environmental engineering and geosciences with artificial neural networks. MIT Press, Cambridge, MA. Apud BASHEER, I. A.; HAJMEER, M. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application. *JouANNI of Microbiological Methods, USA*, v. 43, p. 3-31, 2000.
- FIGUEIREDO, D.V. Poluição na indústria siderúrgica: processo, poluentes e controle das emissões. CETEC ed.. Belo Horizonte, 1985.
- GARDNER, W. M.; DORLING, R. S. Artificial neural networks (the multilayer perceptron) – a review of applications in the atmospheric sciences. *Atmospheric Environment, England*, v. 32, n. 14/15, p. 2627-2636, jun. 1998.
- HAYKIN, S. Neural networks: a comprehensive foundation, 2 ed. Canada: Prentice-Hall, Inc., 1999. 842p.
- HEBB, D.O., 1949. The organization of behaviour: a neurophysical theory, New York: Wiley. Apud HAYKIN, S. Neural networks: a comprehensive foundation, 2 ed. Canada: Prentice-Hall, Inc., 1999. 842p.
- HOOYBERGHS, J., MENSINK, C., DUMONT, G., FIERENS, F., BRASSEUR, O. A neural network forecast for daily average PM₁₀ concentrations in Belgium. *Atmospheric Environment, Belgium*, vol. 39, p. 3279-3289, 2005.
- IRWIN, J. Statistical evaluation of centerline concentration estimates by atmospheric dispersion models, *Int. J. Environment and Pollution*, Vol 10, N° 10, 1999.
- KANG, S., 1991. An investigation of the use of feedforward neural networks for forecasting. PhD. Thesis, Kent State University. Apud ZHANG, G. PATUWO, B.E. HU, M. Y. Forecasting with artificial neural networks: the state of the art. *InteANNtional jouANNI of forecasting, USA*, v. 14, p. 35-62, 1998.
- KOVÁCS, Z.H. Redes neurais artificiais: fundamentos e aplicações, 3 ed. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2002. 174p.
- KUKKONEN, J., PARTANEN, L., KARPPINEN, A., RUUSKANEN, J., JUNNINEN, H., KOLEHMAINEN, M., NISKA, H., DORLING, S., CHATTERTON, T., FOXALL, R.,

- CAWLEY, G. Extensive evaluation of neural network models for the prediction of NO₂ and PM₁₀ concentrations, compared with deterministic modelling system and measurements in central Helsinki. *Atmospheric Environment, Finland*, v. 37, p. 4539-4550, jul. 2003.
- LINYAN, S. WANG, Y. A neural network model for environmental prediction: case study for China. *Computers ind. Engng, China*, vol. 31, p. 879-883, 1995.
- LOONEY, C.G., 1996. Advances in feedforward neural networks: demystifying knowledge acquiring black boxes. *IEEE Trans. Knowledge Data Eng.* 8 (2), 211-226. Apud BASHEER, I. A.; HAJMEER, M. *Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application. Journal of Microbiological Methods, USA*, v. 43, p. 3-31, 2000.
- LU, W. Z.; FAN, H. Y.; LEUNG, A. Y. T.; WONG, J. C. K. Analysis of pollutant levels in central Hong Kong applying neural network method with particle swarm optimization. *Environmental Monitoring and Assessment, Hong Kong*, v. 79, p. 217-230, nov. 2001.
- MALM, W. C. (2000) *Introduction to Visibility*, Cooperative Institute for Research in the Atmosphere (CIARA), Colorado State University, Fort Collins, CO, 2000a. Disponível em: <www.epa.gov/air/visibility/introvis.pdf> Acesso em: 19 dez. 2005.
- MATLAB R12, VERSÃO 5.1, The language of technical computing, Getting started with MATLAB, The Mathworks Inc., 1997, 86p.
- MCCULLOCH, W.S., PITTS, W., 1943. A Logical calculus of the ideas immanent in nervous activity, *Bulletin of Mathematical Biophysics*, vol. 5, p. 115-133. Apud HAYKIN, S. *Neural networks: a comprehensive foundation*, 2 ed. Canada: Prentice-Hall, Inc., 1999. 842p.
- MIE, G., 1908, Beitrage zur optic trubr medien, speciell kolloidaler metallosugen. *Ann. Phys.* 25:377. Disponível em: <[vista.cira.colostate.edu/IMPROVE/Publications / Principle/EPA_Report/epa_report.htm](http://vista.cira.colostate.edu/IMPROVE/Publications/Principle/EPA_Report/epa_report.htm)> Acesso em: 07 jun. 2006.
- MINSK, M.L., PAPERT, S.A., 1988. *Perceptrons*, expanded edition, Cambridge, MA: MIT Press. Apud HAYKIN, S. *Neural networks: a comprehensive foundation*, 2 ed. Canada: Prentice-Hall, Inc., 1999. 842p.
- MITKIEWICZ, GRACE FÁTIMA Metodologia para avaliação da dispersão atmosférica de poluentes provenientes de um complexo siderúrgico industrial. Belo Horizonte: Escola de Engenharia da UFMG, Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, 2002. (Dissertação de Mestrado em Meio Ambiente).
- NISKA, H., HILTUNEN, T., KARPPINEN, A., RUUSKANEN, J., KOLEHMAINEN, M. Evolving the neural network model for forecasting air pollution time series. *Engineering Applications of Artificial Intelligence, Finland*, vol. 17, p. 159-167, 2004.
- OLESEN, H. Model validation kit – status and outlook, National Environmental Research Institute, Dinamarca, 1997.
- OLIVEIRA, E.D. Desenvolvimento de metodologia e de modelos para variáveis de performance em caldeiras de recuperação via redes neurais artificiais. Belo Horizonte: Escola de Engenharia da UFMG, 2003. 101p. (Dissertação, Mestrado em Engenharia Química).
- ORDIERES, J.B., VERGARA, E.P., CAPUZ, R.S., SALAZAR, R.E. Neural network prediction model for fine particulate matter (PM_{2.5}) on the US-Mexico border in El Paso (Texas) and Ciudad Juárez (Chihuahua). *Environmental Modeling & Software, Mexico*, vol. 20, p. 547-559, 2005.
- PEREZ, P. REYES, J. Prediction of particulate air pollution using neural techniques. *Neural Computing & Applications, Chile*, v. 10, p. 165-171, 2001.
- PEREZ, P., REYES, J. Prediction of maximum of 24-h average of PM₁₀ concentrations 30 h in advance in Santiago, Chile. *Atmospheric Environment*, vol. 36, p. 4555-4561, 2002.

- PÉREZ, P., TRIER, A., REYES, J. Prediction of PM_{2.5} concentrations several hours in advance using neural networks. *Atmospheric Environment, Chile*, v. 34, p. 1189-1196, jun. 2000.
- PODNAR, D., KORACIN, D., PANORSKA, A. Application of artificial neural networks to modeling the transport and dispersion of tracers in complex terrain. *Atmospheric Environment, USA*, vol. 36, p. 561-570, 2002.
- POPE, C.A. BURNETT, R.T.B. THUN, M.J. CALLE, E.E. KREWSKI, D. ITO, K. THURSTON, G.D. Lung Cancer, Cardiopulmonary mortality and long-term exposure to fine particulate air pollution. *JAMA*, vol. 287, no 9, 2002.
- ROSENBLATT, F., 1962. *Principles of Neurodynamics*, Washington, DC: Spartan Books. Apud HAYKIN, S. *Neural networks: a comprehensive foundation*, 2 ed. Canada: Prentice-Hall, Inc., 1999. 842p.
- SALVI, S. HOLGATE, S.T. Mechanisms of particulate matter toxicity. *Clinical and Experimental Allergy, UK*, vol. 29, p. 1187-1194, 1999.
- SHEPHERD, G.M., KOCH, C., 1990. Introduction to synaptic circuits, *The Synaptic Organization of the brain*, G.M. Shepherd, ed., p. 3-31. New York: Oxford University Press. Apud HAYKIN, S. *Neural networks: a comprehensive foundation*, 2 ed. Canada: Prentice-Hall, Inc., 1999. 842p.
- SHU, H. LU, H. FAN, H. CHANG, M. CHEN, J. Prediction for energy content of Taiwan municipal solid waste using multilayer perceptron neural networks. *J. Air & Waste Manage. Assoc., China*, v. 56, p. 852-858, 2006.
- SPURNY, K.R. On the physics, chemistry and toxicology of ultrafine anthropogenic, atmospheric aerosols (UAAA): new advances. *Toxicology Letters*, vol. 96, 97, p. 253-261, 1998.
- STATGRAPHICS PLUS, 1995, Manugistic Inc., 2115 Jefferson street, Rockville, MA 20852, USA.
- SWINGLER, K., 1996. *Applying neural networks: a practical guide*. Academic Press, New York. Apud HAJMEER, M. *Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application*. *JouANNI of Microbiological Methods, USA*, v. 43, p. 3-31, 2000.
- UNIVERSITY OF SOUTHERN MAINE, 2000 University of Southern Maine, 2000. Disponível em: <www.usm.maine.edu/psy/broida/101/neuron.JPG> Acesso em: Set. 2006.
- USEPA - UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Air Quality Criteria for Particulate Matter – Vol II – EPA/600/P-99/002a-f, 2004. Disponível em: <www.epa.gov/pmresearch/> Acesso em : 19 dez. 2005
- WAL, J.T., JANSSEN, L.H.J.M. Analysis of spatial and temporal variations of PM10 concentrations in the Netherlands using Kalman filtering. *Atmospheric Environment, Netherlands*, vol. 34, p. 3675-3687, 2000.
- WIDROW, B. MCCOOL, J.M., LARIMORE, M.G., JOHNSON JR, C.R., 1976. Stationary and nonstationary learning characteristics of the LMS adaptive filter, *Proceedings of the IEEE*, vol. 64, p. 1151-1162. Apud HAYKIN, S. *Neural networks: a comprehensive foundation*, 2 ed. Canada: Prentice-Hall, Inc., 1999. 842p.
- WONG, F.S., 1991. Time series forecasting using backpropagation neural networks. *Neurocomputing* 2, 147-159. Apud ZHANG, G. PATUWO, B.E. HU, M. Y. Forecasting with artificial neural networks: the state of the art. *InteANNtional jouANNI of forecasting, USA*, v. 14, p. 35-62, 1998.
- WYTHOFF, B.J., 1993. Backpropagation neural networks: a tutorial *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* 18, 115–155. Apud BASHEER, I. A.; HAJMEER, M. *Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application*. *JouANNI of Microbiological Methods, USA*, v. 43, p. 3-31, 2000.
- ZHANG, G. PATUWO, B.E. HU, M. Y. Forecasting with artificial neural networks: the state of the art. *InteANNtional jouANNI of forecasting, USA*, v. 14, p. 35-62, 1998.

ZICKUS, M., GREIG, A.J., NIRANJAN, M. Comparison of four machine learning methods for predicting PM10 concentrations in Helsinki, Finland. *Water, Air, and Soil Pollution, United Kingdom*, vol. 2, p. 717-729, 2002.

ZUPAN, J., GASTEIGER, J., 1991. Neural networks: a new method for solving chemical problems or just a passing phase? *Anal. Chim. Acta* 248, 1–30. Apud BASHEER, I. A.; HAJMEER, M. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application. *Journal of Microbiological Methods, USA*, v. 43, p. 3-31, 2000.

ANEXOS

ANEXO 1

```
% -----  
% Programa para treinamento de uma MLP (Multi Layer Perceptron)  
% Estimativa de material particulado em suspensao nos pontos de monitoramento da  
% qualidade do ar em Ipatinga  
% Avaliação considerando 6 neurônios na camada de saída  
% -----  
clear;  
tic  
% Carregar o arquivo de dados de entrada e saída  
load('6n.mat');  
% load ('PCs.mat');  
% Dados de entrada e de saída  
% A1 - calmaria, velocidades inferiores a 1 m/s  
% A0, A45, A90, A135, A180, A225, A270, A315 - direção do vento, resolução de 8 petalas  
% Vmed - Velocidade media dos ventos, m/s  
% Tmed - Temperatura media ambiente, oC  
% Ch - Chuva, mm  
% EA - Estações do ano, verao e inverno  
% PC1 - Componente principal 1  
% PC2 - Componente principal 2  
% PC3 - Componente principal 3  
% PC4 - Componente principal 4  
% PC5 - Componente principal 5  
% PC6 - Componente principal 6  
  
% CAPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Cariru, microg/m3  
% BAPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro das Aguas, microg/m3  
% BRPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Bom Retiro, microg/m3  
% ECPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Escritorio Central, microg/m3  
% NCPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Novo Cruzeiro, microg/m3  
% CSPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Castelo, microg/m3  
  
dados=[A0, A1, A45, A90, A135, A180, A225, A270, A315, Vmed, Tmed, Ch, EA, CAPTS, BAPTS,  
BRPTS, ECPTS, NCPTS, CSPTS];  
% dados=[PC1, PC2, PC3, PC4, PC5, PC6, CAPTS, BAPTS, BRPTS, ECPTS, NCPTS, CSPTS];  
% Insercao dos dados de forma aleatoria  
[lin,col] = size(dados);  
D=dados(randperm(lin),:);  
D=dados;  
% Identificação dos parametros de entrada  
P=D(:,1:13);  
% P=D(:,1:6);  
  
% Identificação dos parametros de saída  
T=D(:,14:19);  
% T=D(:,7:12);  
  
% Adequando as dimensoes dos vetores de entrada (E) e saída (PTS)
```

```

P=P';
T=T';

% Normalizar dados de entrada entre -1 e 1
[Pn,minP,maxP]=premnmx(P);

% Normalizar dados de saida entre -1 e 1
[Tn,minT,maxT]=premnmx(T);

% Separacao dos dados para treinamento e validacao
% Valores de entrada de treinamento normalizados
Pt=Pn(:,1:296);

% Valores de entrada de treinamento nao normalizados
Ptt=P(:,1:296);

% Valores de saida de validacao normalizados
Tt=Tn(:,1:296);

% Valores de saida de validacao nao normalizados
Ttt=T(:,1:296);

% Valores de validacao normalizados
val.P=Pn(:,297:371);
val.T=Tn(:,297:371);

% Valores de validacao nao normalizados
valP=P(:,297:371);
valT=T(:,297:371);

% No. de neuronios iniciais e finais da camada oculta e o No. neuronios da saida
[linP,colP] = size(Pt);
[linT,colT] = size(Tt);
nni= round(linP/2);
nnf = (2 * linP) + 1;
nns = linT;

% Salvamento dos dados de treinamento para os dois calculos
save('6n1','Pt','Tt','Ttt','val','valT','valP','nns','nni','nnf','minT','maxT');
% -----
% Programa de treinamento de uma ANN usando o metodo early stopping de parada
% Estimativa de material particulado em suspensao em Ipatinga
% -----
clear
close all
load('6n1')

prompt={'Erro meta', ...
        'Numero maximo de iteracoes'}
def={'0.0001','100'};
dlgTitle='Parametros de treinamento';
lineNo=1;
answer=inputdlg(prompt,dlgTitle,lineNo,def);
eg = str2double(answer{1});

```

```

epoc = str2double(answer{2});

for nno=nni:nnf

% Criação do objeto net
net= newff(minmax(Pt),[nno nns],{'tansig' 'tansig'},'trainlm');

% Parametros de treinamento
net.trainParam.epochs = epoc;
net.trainParam.goal = eg;
net.trainParam.show = 1;
% Treinamento da rede com regularização
[net] = train(net,Pt,Tt,[],[],val);

% Simulando a rede para os padroes de treinamento
ytr=sim(net,Pt);

% Simulando a rede para os padroes de validação
yval=sim(net,val.P);

% Desnormalização dos padroes de treinamento
y_tr = postmnmx(ytr,minT,maxT);

% Desnormalização dos padroes de validação
y_val = postmnmx(yval,minT,maxT);

% Erro de treinamento para o Bairro Cariru
erro_tr_CA = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
mse_CA_tre=mse(erro_tr_CA);

% Erro de treinamento para o Bairro das Aguas
erro_tr_BA = Ttt(2,:) - y_tr(2,:);
mse_BA_tre=mse(erro_tr_BA);

% Erro de treinamento para o Bairro Bom Retiro
erro_tr_BR = Ttt(3,:) - y_tr(3,:);
mse_BR_tre=mse(erro_tr_BR);
% Erro de treinamento para o Bairro Escritorio Central
erro_tr_EC = Ttt(4,:) - y_tr(4,:);
mse_EC_tre=mse(erro_tr_EC);

% Erro de treinamento para o Bairro Novo Cruzeiro
erro_tr_NC = Ttt(5,:) - y_tr(5,:);
mse_NC_tre=mse(erro_tr_NC);

% Erro de treinamento para o Bairro Castelo
erro_tr_CS = Ttt(6,:) - y_tr(6,:);
mse_CS_tre=mse(erro_tr_CS);

% Erro de validação para o Bairro Cariru
erro_val_CA = valT(1,:) - y_val(1,:);
mse_CA_val=mse(erro_val_CA);

% Erro de validação para o Bairro das Aguas

```

```

erro_val_BA = valT(2,:) - y_val(2,:);
mse_BA_val=mse(erro_val_BA);

% Erro de validação para o Bairro Bom Retiro
erro_val_BR = valT(3,:) - y_val(3,:);
mse_BR_val=mse(erro_val_BR);

% Erro de validação para o Bairro Escritorio Central
erro_val_EC = valT(4,:) - y_val(4,:);
mse_EC_val=mse(erro_val_EC);

% Erro de validação para o Bairro Novo Cruzeiro
erro_val_NC = valT(5,:) - y_val(5,:);
mse_NC_val=mse(erro_val_NC);
% Erro de validação para o Bairro Castelo
erro_val_CS = valT(6,:) - y_val(6,:);
mse_CS_val=mse(erro_val_CS);

erro_val=valT -y_val;
mse_val(nno,nni)=mse(erro_val);

plot(erro_val_CA, 'g-');
hold on
plot(erro_val_BA, 'm-');
hold on
plot(erro_val_BR, 'y-');
hold on
plot(erro_val_EC, 'b-');
hold on
plot(erro_val_NC, 'k-');
hold on
plot(erro_val_CS, 'c-');
s=clock;
save (strcat(num2str(nno)));
t(nno)=toc;
end

```

```

% -----
% Programa para treinamento de uma MLP (Multi Layer Perceptron)
% Estimativa de material particulado em suspensao nos pontos de monitoramento da
% qualidade do ar em Ipatinga
% Avaliação considerando 1 neurônio na camada de saída
% -----

clear;
tic
% Carregar o arquivo de dados de entrada e saída
load('Ban.mat');
% load('Can.mat');
% load('Brn.mat');
% load('Ncn.mat');
% load('Ecn.mat');
% load('Csn.mat');

% Dados de entrada e de saída
% 1 - calmaria, velocidades inferiores a 1 m/s
% 0, 45, 90, 135, 180, 225, 270, 315 - direção do vento, resolução de 8 petalas
% Vmed - Velocidade media dos ventos, m/s
% Tmed - Temperatura media ambiente, oC
% mm - Chuva, mm
% EA - Estações do ano, verao e inverno
% CAPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Cariru, microg/m3
% BAPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro das Aguas, microg/m3
% BRPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Bom Retiro, microg/m3
% ECPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Escritorio Central, microg/m3
% NCPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Novo Cruzeiro, microg/m3
% CSPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Castelo, microg/m3

dados=[BA0, BA1, BA45, BA90, BA135, BA180, BA225, BA270, BA315, BAvmed, BATmed,
BAm, BAEA, BAPTS];
% dados=[CA0, CA1, CA45, CA90, CA135, CA180, CA225, CA270, CA315, CAvmed, CATmed,
CAm, CAEA, CAPTS];
% dados=[BR0, BR1, BR45, BR90, BR135, BR180, BR225, BR270, BR315, BRvmed, BRTmed,
BRm, BREA, BRPTS];
% dados=[EC0, EC1, EC45, EC90, EC135, EC180, EC225, EC270, EC315, ECvmed, ECTmed,
ECm, ECEA, ECPTS];
% dados=[NC0, NC1, NC45, NC90, NC135, NC180, NC225, NC270, NC315, NCvmed, NCTmed,
NCm, NCEA, NCPTS];
% dados=[CS0, CS1, CS45, CS90, CS135, CS180, CS225, CS270, CS315, CSvmed, CSTmed,
CSm, CSEA, CSPTS];

% Insercao dos dados de forma aleatoria
[lim,col] = size(dados);
D=dados(randperm(lim),:);

% Identificação dos parametros de entrada
P=D(:,1:13);

% Identificação dos parametros de saída
T=D(:,14);

```

```

% Adequando as dimensoes dos vetores de entrada (E) e saida (PTS)
P=P';
T=T';

% Normalizar dados de entrada entre -1 e 1
[Pn,minP,maxP]=premnmx(P);

% Normalizar dados de saida entre -1 e 1
[Tn,minT,maxT]=premnmx(T);

% Separacao dos dados para treinamento e validacao
% Valores de entrada de treinamento normalizados
Pt=Pn(:,1:352);% BA
% Pt=Pn(:,1:349);% CA
% Pt=Pn(:,1:350);% CS
% Pt=Pn(:,1:342);% NC
% Pt=Pn(:,1:350);% BR
% Pt=Pn(:,1:314);% EC

% Valores de entrada de treinamento nao normalizados
Ptt=P(:,1:352);% BA
% Ptt=P(:,1:349);% CA
% Ptt=P(:,1:350);% CS
% Ptt=P(:,1:342);% NC
% Ptt=P(:,1:350);% BR
% Ptt=P(:,1:314);% EC

% Valores de saida de validacao normalizados
Tt=Tn(:,1:352);% BA
% Tt=Tn(:,1:349);% CA
% Tt=Tn(:,1:350);% CS
% Tt=Tn(:,1:342);% NC
% Tt=Tn(:,1:350);% BR
% Tt=Tn(:,1:314);% EC

% Valores de saida de validacao nao normalizados
Ttt=T(:,1:352);% BA
% Ttt=T(:,1:349);% CA
% Ttt=T(:,1:350);% CS
% Ttt=T(:,1:342);% NC
% Ttt=T(:,1:350);% BR
% Ttt=T(:,1:314);% EC

% Valores de validacao normalizados
val.P=Pn(:,353:439);% BA
% val.P=Pn(:,350:435);% CA
% val.P=Pn(:,351:436);% CS
% val.P=Pn(:,343:426);% NC
% val.P=Pn(:,351:436);% BR
% val.P=Pn(:,315:392);% EC

val.T=Tn(:,353:439);% BA

```

```

% val.T=Tn(:,350:435);% CA
% val.T=Tn(:,351:436);% CS
% val.T=Tn(:,343:426);% NC
% val.T=Tn(:,351:436);% BR
% val.T=Tn(:,315:392);% EC

% Valores de validacao nao normalizados
valP=P(:,353:439);% BA
% valP=P(:,350:435);% CA
% valP=P(:,351:436);% CS
% valP=P(:,343:426);% NC
% valP=P(:,351:436);% BR
% valP=P(:,315:392);% EC

valT=T(:,353:439);% BA
% valT=T(:,350:435);% CA
% valT=T(:,351:436);% CS
% valT=T(:,343:426);% NC
% valT=T(:,351:436);% BR
% valT=T(:,315:392);% EC

% No. de neuronios iniciais e finais da camada oculta e o No. neuronios da saida
[limP,colP] = size(Pt);
[limT,colT] = size(Tt);
nni= round(limP/2);
nnf = (2*limP) +1;
nns = limT;

% Salvamento dos dados de treinamento para os dois calculos
save('1n1', 'Pt', 'Tt', 'Ttt', 'val', 'valT', 'valP', 'nns', 'nni', 'nnf', 'minT', 'maxT');
% -----
% Programa de treinamento de uma ANN usando o metodo early stopping de parada
% Estimativa de material particulado em suspensao em Ipatinga
% -----

clear
close all
load('1n1')

prompt={'Erro meta', ...
        'Numero maximo de iteracoes'}

def={'0.0001','100'};
dlgTitle='Parametros de treinamento';
lineNo=1;
answer=inputdlg(prompt,dlgTitle,lineNo,def);
eg = str2double(answer{1});
epoc = str2double(answer{2});

for nno=nni:nnf

% Criacao do objeto net
net= newff(minmax(Pt),[nno nns],{'tansig' 'tansig'},'trainlm');

% Parametros de treinamento

```

```

net.trainParam.epochs = epoc;
net.trainParam.goal = eg;
net.trainParam.show = 1;

% Treinamento da rede com regularização
[net] = train(net,Pt,Tt,[],[],val);

% Simulando a rede para os padroes de treinamento
ytr=sim(net,Pt);
% Simulando a rede para os padroes de validação
yval=sim(net,val.P);

% Desnormalização dos padroes de treinamento
y_tr = postmnmx(ytr,minT,maxT);

% Desnormalização dos padroes de validação
y_val = postmnmx(yval,minT,maxT);

% Erro de treinamento para o Bairro Cariru
% erro_tr_CA = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_CA_tre=mse(erro_tr_CA);

% Erro de treinamento para o Bairro das Aguas
erro_tr_BA = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
mse_BA_tre=mse(erro_tr_BA);

% Erro de treinamento para o Bairro Bom Retiro
% erro_tr_BR = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_BR_tre=mse(erro_tr_BR);
% Erro de treinamento para o Bairro Escritorio Central
% erro_tr_EC = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_EC_tre=mse(erro_tr_EC);

% Erro de treinamento para o Bairro Novo Cruzeiro
% erro_tr_NC = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_NC_tre=mse(erro_tr_NC);

% Erro de treinamento para o Bairro Castelo
% erro_tr_CS = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_CS_tre=mse(erro_tr_CS);

% % Erro de validação para o Bairro Cariru
% erro_val_CA = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_CA_val(nno,nni)=mse(erro_val_CA);

% Erro de validação para o Bairro das Aguas
erro_val_BA = valT(1,:) - y_val(1,:);
mse_BA_val(nno,nni)=mse(erro_val_BA);

% Erro de validação para o Bairro Bom Retiro
% erro_val_BR = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_BR_val(nno,nni)=mse(erro_val_BR);

% Erro de validação para o Bairro Escritorio Central

```

```

% erro_val_EC = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_EC_val(nno,nni)=mse(erro_val_EC);

% Erro de validação para o Bairro Novo Cruzeiro
% erro_val_NC = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_NC_val(nno,nni)=mse(erro_val_NC);

% Erro de validação para o Bairro Castelo
% erro_val_CS = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_CS_val(nno,nni)=mse(erro_val_CS);

% erro_val=valT -y_val;
% mse_val(nno,nni)=mse(erro_val);

% plot(erro_val_CA, 'g-');
% hold on
% plot(erro_val_BA, 'm-');
% hold on
% plot(erro_val_BR, 'y-');
% hold on
% plot(erro_val_EC, 'b-');
% hold on
% plot(erro_val_NC, 'k-');
% hold on
% plot(erro_val_CS, 'c-');
% plot(valT, 'm-');
% hold on
% plot(y_val, 'g-');
s=clock;
save (strcat(num2str(nno)));
% save mse_val;
t(nno)=toc;
end

```

```

% -----
% Programa para treinamento de uma MLP (Multi Layer Perceptron)
% Estimativa de material particulado em suspensao nos pontos de monitoramento da
% qualidade do ar em Ipatinga
% Avaliação considerando 6 neurônios na camada de entrada
% -----

clear;
tic
% Carregar o arquivo de dados de entrada e saida
% load('Ban.mat');
% load('Can.mat');
% load('Brn.mat');
% load('Ncn.mat');
% load('Ecn.mat');
load('Csn.mat');
load('In6entradas');
% Dados de entrada e de saida
% 1 - calmaria, velocidades inferiores a 1 m/s
% 0, 45, 90, 135, 180, 225, 270, 315 - direção do vento, resolução de 8 petalas
% Vmed - Velocidade media dos ventos, m/s
% Tmed - Temperatura media ambiente, oC
% mm - Chuva, mm
% EA - Estações do ano, verao e inverno
% CAPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Cariru, microg/m3
% BAPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro das Aguas, microg/m3
% BRPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Bom Retiro, microg/m3
% ECPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Escritorio Central, microg/m3
% NCPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Novo Cruzeiro, microg/m3
% CSPTS - Concentração de material particulado em suspensao no bairro Castelo, microg/m3

% dados=[A1nBA, BAPTS];
% dados=[A1nCA, CAPTS];
% dados=[A1nBR, BRPTS];
% dados=[A1nEC, ECPTS];
% dados=[A1nNC, NCPTS];
dados=[A1nCS, CSPTS];

% Insercao dos dados de forma aleatoria
[lim,col] = size(dados);
D=dados(randperm(lim),:);

% Identificação dos parametros de entrada
P=D(:,1:6);

% Identificação dos parametros de saida
T=D(:,7);

% Adequando as dimensoes dos vetores de entrada (E) e saida (PTS)
P=P';
T=T';

% Normalizar dados de entrada entre -1 e 1
[Pn,minP,maxP]=premmx(P);

```

```

% Normalizar dados de saida entre -1 e 1
[Tn,minT,maxT]=premmx(T);

% Separacao dos dados para treinamento e validacao
% Valores de entrada de treinamento normalizados
% Pt=Pn(:,1:352);% BA
% Pt=Pn(:,1:349);% CA
Pt=Pn(:,1:350);% CS
% Pt=Pn(:,1:342);% NC
% Pt=Pn(:,1:350);% BR
% Pt=Pn(:,1:314);% EC

% Valores de entrada de treinamento nao normalizados
% Ptt=P(:,1:352);% BA
% Ptt=P(:,1:349);% CA
Ptt=P(:,1:350);% CS
% Ptt=P(:,1:342);% NC
% Ptt=P(:,1:350);% BR
% Ptt=P(:,1:314);% EC

% Valores de saida de validacao normalizados
% Tt=Tn(:,1:352);% BA
% Tt=Tn(:,1:349);% CA
Tt=Tn(:,1:350);% CS
% Tt=Tn(:,1:342);% NC
% Tt=Tn(:,1:350);% BR
% Tt=Tn(:,1:314);% EC

% Valores de saida de validacao nao normalizados
% Ttt=T(:,1:352);% BA
% Ttt=T(:,1:349);% CA
Ttt=T(:,1:350);% CS
% Ttt=T(:,1:342);% NC
% Ttt=T(:,1:350);% BR
% Ttt=T(:,1:314);% EC

% Valores de validacao normalizados
% val.P=Pn(:,353:439);% BA
% val.P=Pn(:,350:435);% CA
val.P=Pn(:,351:436);% CS
% val.P=Pn(:,343:426);% NC
% val.P=Pn(:,351:436);% BR
% val.P=Pn(:,315:392);% EC

% val.T=Tn(:,353:439);% BA
% val.T=Tn(:,350:435);% CA
val.T=Tn(:,351:436);% CS
% val.T=Tn(:,343:426);% NC
% val.T=Tn(:,351:436);% BR
% val.T=Tn(:,315:392);% EC

% Valores de validacao nao normalizados
% valP=P(:,353:439);% BA

```

```

% valP=P(:,350:435);% CA
valP=P(:,351:436);% CS
% valP=P(:,343:426);% NC
% valP=P(:,351:436);% BR
% valP=P(:,315:392);% EC

% valT=T(:,353:439);% BA
% valT=T(:,350:435);% CA
valT=T(:,351:436);% CS
% valT=T(:,343:426);% NC
% valT=T(:,351:436);% BR
% valT=T(:,315:392);% EC

% No. de neuronios iniciais e finais da camada oculta e o No. neuronios da saida
[limP,colP] = size(Pt);
[limT,colT] = size(Tt);
nni= round(limP/2);
nnf = (2*limP) +1;
nns = limT;

% Salvamento dos dados de treinamento para os dois calculos
save('In1', 'Pt', 'Tt', 'Ttt', 'val','valT', 'valP', 'nns', 'nni', 'nnf', 'minT', 'maxT');
% -----
% Programa de treinamento de uma ANN usando o metodo early stopping de parada
% Estimativa de material particulado em suspensao em Ipatinga
% -----
clear
close all
load('In1')

prompt={'Erro meta', ...
        'Numero maximo de iteracoes'}

def={'0.0001','100'};
dlgTitle='Parametros de treinamento';
lineNo=1;
answer=inputdlg(prompt,dlgTitle,lineNo,def);
eg = str2double(answer{1});
epoc = str2double(answer{2});

for nno=nni:nnf

% Criação do objeto net
net= newff(minmax(Pt),[nno nns],{'tansig' 'tansig'},'trainlm');

% Parametros de treinamento
net.trainParam.epochs = epoc;
net.trainParam.goal = eg;
net.trainParam.show = 1;

% Treinamento da rede com regularização
[net] = train(net,Pt,Tt,[],[],val);

% Simulando a rede para os padoes de treinamento

```

```

ytr=sim(net,Pt);

% Simulando a rede para os padroes de validação
yval=sim(net,val.P);

% Desnormalização dos padroes de treinamento
y_tr = postmnmx(ytr,minT,maxT);

% Desnormalização dos padroes de validação
y_val = postmnmx(yval,minT,maxT);

% Erro de treinamento para o Bairro Cariru
% erro_tr_CA = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_CA_tre=mse(erro_tr_CA);

% Erro de treinamento para o Bairro das Aguas
% erro_tr_BA = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_BA_tre=mse(erro_tr_BA);

% Erro de treinamento para o Bairro Bom Retiro
% erro_tr_BR = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_BR_tre=mse(erro_tr_BR);

% Erro de treinamento para o Bairro Escritorio Central
% erro_tr_EC = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_EC_tre=mse(erro_tr_EC);

% Erro de treinamento para o Bairro Novo Cruzeiro
% erro_tr_NC = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
% mse_NC_tre=mse(erro_tr_NC);

% Erro de treinamento para o Bairro Castelo
erro_tr_CS = Ttt(1,:) - y_tr(1,:);
mse_CS_tre=mse(erro_tr_CS);

% Erro de validação para o Bairro Cariru
% erro_val_CA = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_CA_val(nno,nni)=mse(erro_val_CA);

% Erro de validação para o Bairro das Aguas
% erro_val_BA = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_BA_val(nno,nni)=mse(erro_val_BA);

% Erro de validação para o Bairro Bom Retiro
% erro_val_BR = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_BR_val(nno,nni)=mse(erro_val_BR);

% Erro de validação para o Bairro Escritorio Central
% erro_val_EC = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_EC_val(nno,nni)=mse(erro_val_EC);

% Erro de validação para o Bairro Novo Cruzeiro
% erro_val_NC = valT(1,:) - y_val(1,:);
% mse_NC_val(nno,nni)=mse(erro_val_NC);

```

```

% Erro de validação para o Bairro Castelo
erro_val_CS = valT(1,:) - y_val(1,:);
mse_CS_val(nno,nni)=mse(erro_val_CS);
%
% erro_val=valT -y_val;
% mse_val(nno,nni)=mse(erro_val);

% plot(erro_val_CA, 'g-');
% hold on
% plot(erro_val_BA, 'm-');
% hold on
% plot(erro_val_BR, 'y-');
% hold on
% plot(erro_val_EC, 'b-');
% hold on
% plot(erro_val_NC, 'k-');
% hold on
% plot(erro_val_CS, 'c-');
% plot(valT, 'm-');
% hold on
% plot(y_val, 'g-');
s=clock;
save (strcat(num2str(nno)));
% save mse_val;
t(nno)=toc;
end

```