



# MODELAGEM COMPUTACIONAL DO CICLO DO OZÔNIO APLICADA AO MONITORAMENTO DA QUALIDADE DO AR

**Palavras-chave:** Modelagem Computacional, Ciclo do Ozônio, Qualidade do Ar

Thiago da Silva Ferreira Alves,  
Prof. Dr. Diego Samuel Rodrigues

Faculdade de Tecnologia, Universidade Estadual de Campinas

## 1 Introdução

Em se tratando de estudos preditivos, a análise de dados de monitoramento ambiental é apenas o primeiro passo para a elaboração de previsões de concentrações de poluentes atmosféricos. Para desenvolvê-las, é necessário recorrer a abordagens teóricas, cuja base constitui-se de modelos matemáticos e computacionais [1]. A partir deles, torna-se possível simular e prever diferentes cenários de poluição do ar e analisar a influência de fatores que influenciam nesse processo, com a vantagem de não estar sujeito às limitações de escala, de tempo e de recursos financeiros requeridas nas abordagens experimentais. Na prática, essas características tornam os modelos matemáticos e computacionais imprescindíveis para o estudo de sistemas ambientais reais [2].

A modelagem computacional desenvolvida neste trabalho motivou-se em dados horários de concentração dos referidos poluentes medidos em estações fixas de monitoramento da qualidade do ar da Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB). Esses dados estão disponíveis de forma pública e gratuita no sistema QUALAR [3]. Dentre as 62 estações fixas da CETESB, as de interesse para o presente projeto são aquelas que possuem séries históricas de medidas de concentrações dos poluentes  $O_3$ ,  $NO_2$  e  $NO$  e também de radiação solar global (RADG) – 31 estações, cuja possui influência dinâmica na concentração dos referidos poluentes.

Para ilustrar essa influência dinâmica na forma de correlação, tem-se a Figura 1 para dados horários de RADG e  $O_3$  medidos ao longo de uma semana na estação de Campinas-Taquaral. Entretanto, a despeito do exemplo, vale ressaltar que correlação e causalidade não são sinônimos, e sequer é necessário que haja correlação para haver causalidade [4]. Por isso, a abordagem de correlação estatística é insuficiente para se estabelecer relações causais, as quais serão devidamente abordadas por meio da modelagem dinâmica empírica (*empirical dynamic modeling* – EDM).

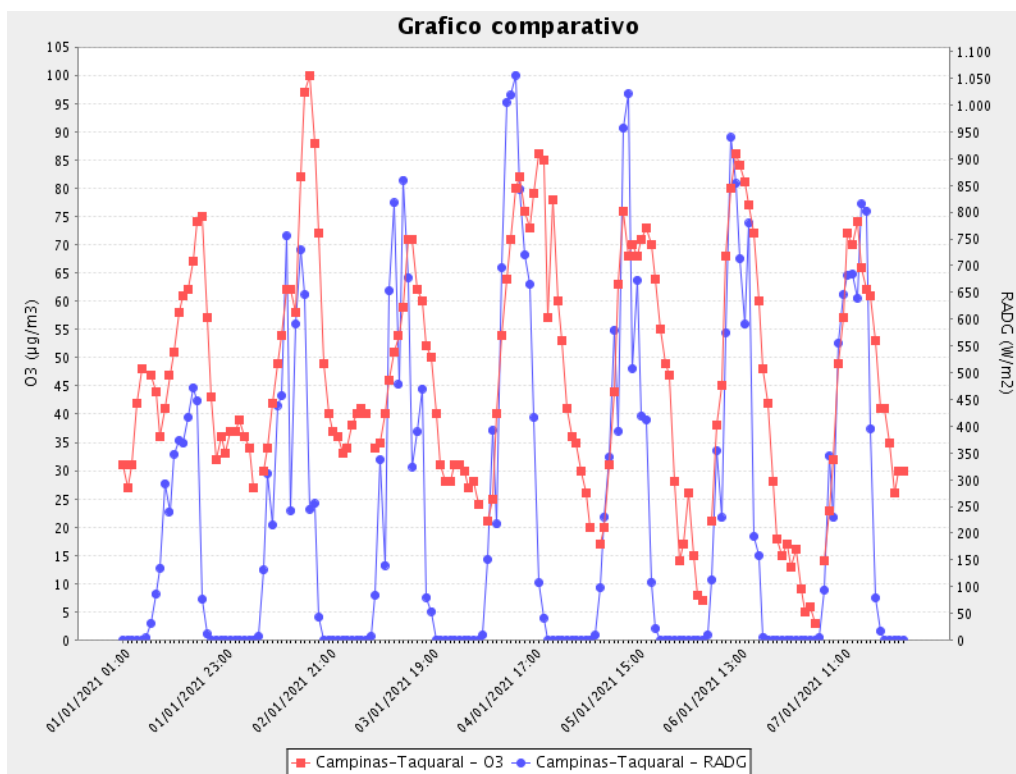


Figura 1: Média horária da concentração de O<sub>3</sub> e da intensidade da radiação solar na Estação de Campinas-Taquaral na primeira semana de janeiro de 2021. Fonte: elaborado pelo autores através do sistema QUALAR [3].

Com relação aos objetivos, o presente trabalho refere-se a um estudo computacional sobre a dinâmica temporal do ciclo do ozônio troposférico, a fim de aprofundar-se na teoria da reconstrução de espaço de estados e na investigação de causalidade em séries temporais observadas em ecossistemas ambientais reais [4, 5, 6], dando destaque a temática do ciclo do ozônio troposférico. Assim, o principal objetivo de desenvolvimento da pesquisa é a produção de previsões quantitativas para a evolução temporal dos poluentes atmosféricos que o constituem (O<sub>3</sub>, NO e NO<sub>2</sub>).

## 2 Metodologia

A ideia fundamental dos métodos de modelagem dinâmica empírica é o Teorema de Takens [7]. Seu uso prático no projeto foi altamente favorecido pelo uso do pacote computacional `rEDM` em linguagem R, que também está disponível na linguagem `python` (`pyEDM`). Ambos contêm uma coleção de métodos robustos que estão disponíveis para serem instalados gratuitamente por meio de um repositório do GitHub mantido pelo pesquisador de maior prestígio dessa área [8].

O EDM é uma metodologia que se baseia na teoria matemática de reconstrução de variedades atratoras a partir de dados de séries temporais, cujas aplicações incluem principalmente a previsão de séries temporais e estudos sobre inferência causal. O pacote supracitado é o estado-da-arte na área. Está disponível apenas desde o ano 2022, e além do *convergent cross mapping* [4], comumente utilizado para reconstrução do espaço de estados, permite explorar diversos EDMs, inclusive o multivariado [9].

Em se tratando dos dados utilizados para obtenção de resultados numéricos, utilizou-se os dados de concentração da média horária de cada poluente (NO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>) referente ao meses de fevereiro, março, abril e maio do ano de 2023 da estação de Campinas-Taquaral, sendo essas informações extraídas da bases de dados QUALAR da CETESB [3]. Vale ressaltar que buscou-se utilizar os dados mais atuais disponíveis que apresentassem também consistência, sendo utilizados os primeiros 1695 pontos da série temporal para calibração (*lib*) e os demais 847 para predição, totalizando uma série temporal de 2542 pontos. Tal distribuição escolhida entre calibração e predição foi feita em aproximadamente 2/3 e 1/3 da série temporal, respectivamente. Isso é válido ressaltar, uma vez que dependendo da quantidade de dados utilizados para calibração e predição, assim como das propriedades dos mesmos, pode-se obter diferentes resultados e interpretações.

### 3 Resultados e Discussão

Como principal resultado da presente pesquisa, evidencia-se as previsões quantitativas para a evolução temporal dos poluentes atmosféricos O<sub>3</sub>, NO e NO<sub>2</sub>, sendo cada um deles evidenciados na Figura 2, 3 e 4, nas quais os valores para as séries cronológicas são destacados em azul e os valores previstos são exibidos em vermelho. Nessas figuras nota-se que a previsão estabelecida é consistente com os dados observados, principalmente em se tratando da concentração de ozônio. Porém, do ponto de vista qualitativo o modelo computacional utilizado não fornece um resultado tão preciso para os demais poluentes anteriormente mencionados, principalmente em detrimento de variações “bruscas” de concentrações do mesmos.

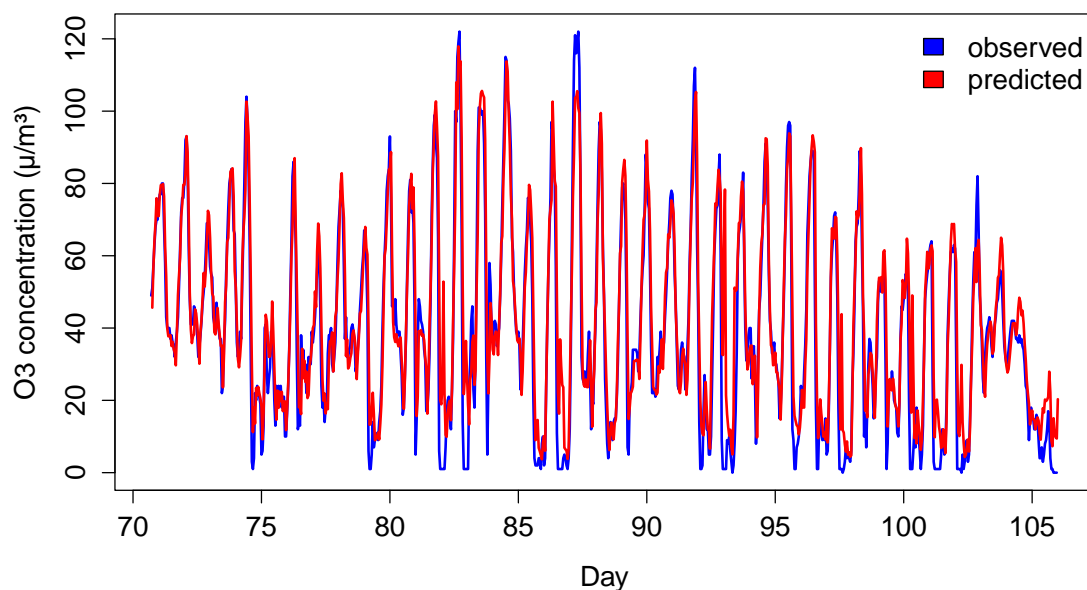


Figura 2: Previsão do padrão temporal da concentração de ozônio obtida através da linguagem R com o pacote `rEDM`.

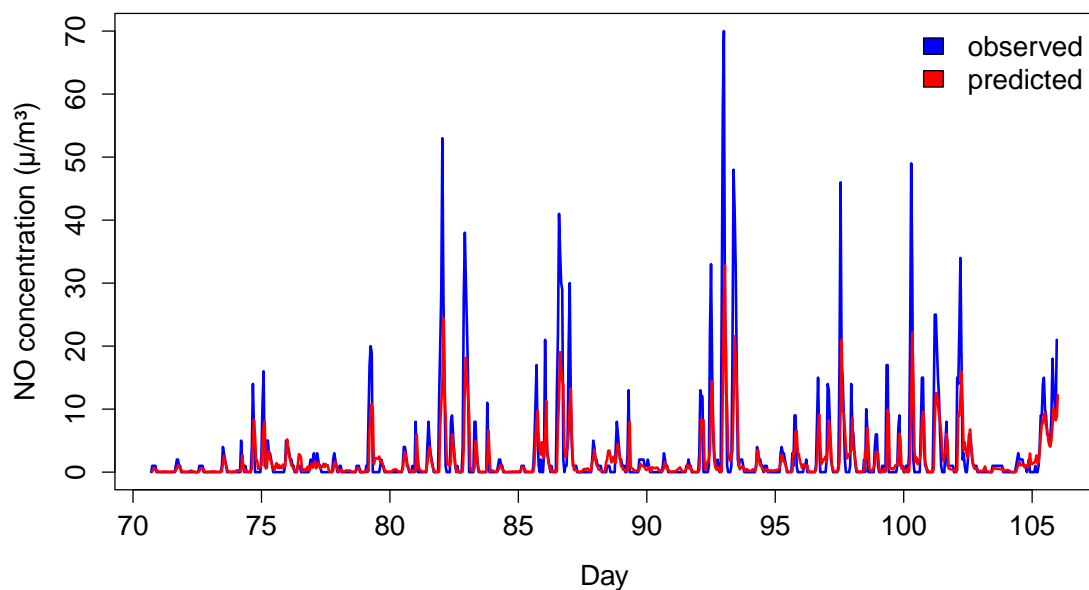


Figura 3: Previsão do padrão temporal da concentração de óxido nítrico obtida através da linguagem R com o pacote `rEDM`.

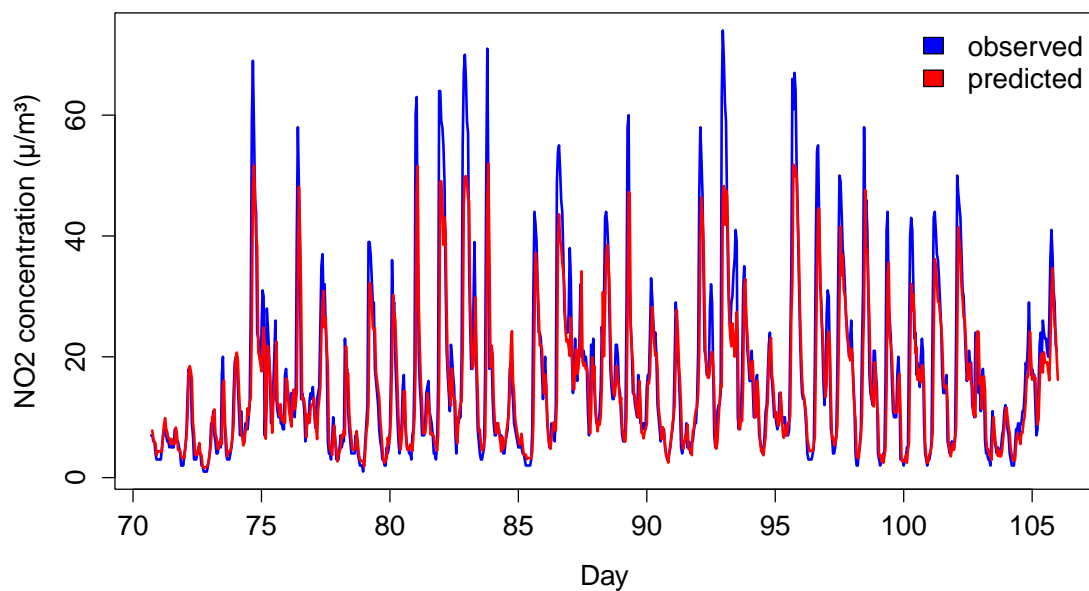


Figura 4: Previsão do padrão temporal da concentração de dióxido de nitrogênio obtida através da linguagem R com o pacote `rEDM`.

## 4 Considerações Finais

Conforme discutido anteriormente, a previsão estabelecida é consistente com os dados observados, mas não para todos os poluentes. Acredita-se que isso ocorra devido as variações bruscas

---

de concentrações, principalmente em relação a NO e NO<sub>2</sub>. Logo acredita-se que a metodologia utilizada tenha determinada dificuldade em captar tais picos de variações, mas as razões que expliquem tal fenômeno demandam estudos mais aprofundados que serão realizados posteriormente.

## Referências

- [1] NRC (National Research Council), “[Models in Environmental Regulatory Decision Making](#),” 2007. Committee on Models in the Regulatory Decision Process, Board on Environmental Studies and Toxicology, Division on Earth and Life Studies. Washington, DC: National Academies Press.
- [2] EPA (US Environmental Protection Agency), “[Guidance on the Development, Evaluation, and Application of Environmental Models \(EPA/100/K-09/003\)](#),” 2009. Council for Regulatory Environmental Modeling. Washington, DC: Office of the Science Advisor.
- [3] <https://cetesb.sp.gov.br/ar/qualar>.
- [4] G. Sugihara, R. May, H. Ye, C. h. Hsieh, E. Deyle, M. Fogarty, and S. Munch, “[Detecting Causality in Complex Ecosystems](#),” *Science*, vol. 338, pp. 496–500, 2012.
- [5] G. Sugihara and R. M. May, “[Nonlinear Forecasting as a Way of Distinguishing Chaos from Measurement Error in Time Series](#),” *Nature*, vol. 344, pp. 734–441, 1990.
- [6] G. Sugihara, “[Nonlinear Forecasting for the Classification of Natural Time Series](#),” *Philosophical Transactions of The Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences*, vol. 348, pp. 477–495, 1994.
- [7] F. Takens, “[Detecting Strange Attractors in Turbulence](#),” in *Lecture Notes in Mathematics*, pp. 366–381, Springer, 1981.
- [8] G. Sugihara, J. Park, E. Deyle, C. Smith, and H. Ye, *Empirical Dynamic Modeling*, 2022.
- [9] H. Ye and G. Sugihara, “[Information Leverage in Interconnected Ecosystems: Overcoming the Curse of Dimensionality](#),” *Science*, vol. 353, no. 6302, pp. 922–925, 2016.