

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS**  
Instituto de Física e Matemática  
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática



Dissertação

**Assimilação de Dados na Estimativa de Concentração de Poluentes Atmosféricos**

**Larri Silveira Pereira**

Pelotas, 2016

**Larri Silveira Pereira**

**Assimilação de Dados na Estimativa de Concentração de Poluentes Atmosféricos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática

Orientador: Prof. Dr. Fabrício Pereira Härter  
Coorientador: Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros

Pelotas, 2016

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas  
Catalogação na Publicação

P436a Pereira, Larri Silveira

Assimilação de dados na estimativa de concentração de poluentes atmosféricos / Larri Silveira Pereira ; Fabrício Pereira Härter, orientador ; Régis Sperotto de Quadros, coorientador. — Pelotas, 2016.

49 f. : il.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2016.

1. Advecção-difusão. 2. Dispersão de contaminantes. 3. Kalman filter. 4. Solução numérica. 5. Giltt. I. Härter, Fabrício Pereira, orient. II. Quadros, Régis Sperotto de, coorient. III. Título.

CDD : 571.956

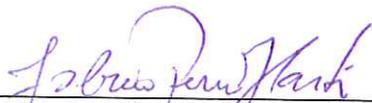
Larri Silveira Pereira

Assimilação de dados na estimativa de concentração de poluentes atmosféricos

Dissertação aprovada, como requisito parcial, para obtenção do grau de Mestre em Modelagem Matemática, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas.

Data da Defesa: 04 de março de 2016

Banca examinadora:



Prof. Dr. Fabrício Pereira Härter (Orientador)

Doutor em Computação Aplicada pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Brasil



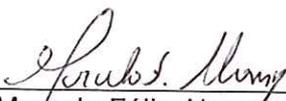
Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros (Co-Orientador)

Doutor em Matemática Aplicada pela Technische Universität Darmstadt, Alemanha



Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Daniela Buske

Doutora em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil



Prof. Dr. Marcelo Félix Alonso

Doutor em Meteorologia pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Brasil



Prof. Dr. Leonardo Calvetti

Doutor em Meteorologia pela Universidade de São Paulo, Brasil

**Dedico este trabalho a Deus e aos meus pais.**

## AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, a Deus por tudo que me foi dado, mas principalmente pela persistência para alcançar mais esta conquista.

Agradeço à minha família, especialmente aos meus pais, Carmen Vera Silveira Pereira e Laerte Moreno Pereira, por todo carinho, incentivo e apoio durante toda a minha vida, sobretudo durante esta jornada chamada Mestrado.

Agradeço, aos meus amigos e colegas por seus incentivos e apoios, de maneira especial aos meus amigos, Jaime Conte Zandoná e Matheus Rodrigues Flores, pela sua amizade durante os bons e maus momentos desta caminhada.

Agradeço aos professores da UFPel, em especial aos integrantes do PPGMMat, que colaboraram com a minha formação. Agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) por seu suporte financeiro. Por fim, agradeço a todos que acreditaram e torceram por mim durante esta caminhada de estudo e a todos que de alguma maneira colaboraram com a realização deste trabalho.

**There is nothing noble in being superior to your fellow men.  
True nobility lies in being superior to your former self.**

— ERNEST HEMINGWAY

## RESUMO

PEREIRA, Larri Silveira. **Assimilação de Dados na Estimativa de Concentração de Poluentes Atmosféricos**. 2016. 49 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2016.

Neste trabalho modela-se a camada limite planetária para condições instáveis (problema 2D estacionário) e se assimila, através do *extended Kalman filter* (EKF), os dados coletados no experimento de Copenhagen. Ratifica-se a importância da assimilação de dados em modelos de química da atmosfera e se avalia a performance do EKF aplicado ao problema de estimativa de concentração de poluentes em questão. Como o experimento de Copenhagen, para a modelagem estudada, fornece dados apenas para camada próxima a superfície terrestre em apenas três distâncias da fonte, serão realizados experimentos assimilando-se dados sintéticos. Os objetivos específicos são avaliar a assimilação de dados sintéticos com diferentes amostragens na coordenada horizontal ( $x$ ) e com diferentes distribuições nos níveis verticais do modelo através do erro quadrático médio (NMSE). Experimentos preliminares mostram que o EKF é eficiente em corrigir a trajetória do modelo nos pontos de inserção do dado, porém há forte descontinuidade devido a pouca quantidade de dados assimilados.

**Palavras-chave:** Advecção-Difusão, Dispersão de Contaminantes, *Kalman filter*, Solução Numérica, GILTT.

## ABSTRACT

PEREIRA, Larri Silveira. **Kalman filter applied to the dispersion method**. 2016. 49 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2016.

In this work a planetary boundary layer to unstable conditions is modeled (stationary 2D problem) and the Copenhagen collected data are assimilated by the extended Kalman filter. The importance of data assimilation procedure in atmospheric chemistry models is highlighted and preliminary experiments are performed. The results show effectiveness of the filter, however there are a spike in the assimilated curve due the lack of information given by the small amount of data in Copenhagen experiment. This issue must be overcome through the assimilation of synthetic data.

**Keywords:** Advection-Diffusion, Contaminants Dispersion, Kalman Filter, Analytical Solution, GILTT.

## LISTA DE FIGURAS

1	Diagrama esquemático do filtro de Kalman linear . . . . .	31
2	Experimento de Copenhagen. . . . .	34
3	Modelo do filtro de Kalman linear conjunto . . . . .	37
4	Efeito da frequência de observação no EFK: (a) EXP2, (b) EXP4 . . . . .	39
5	Efeito dos diferentes números de sensores na direção- $z$ no EKF: (a) EXP7, (b) EXP8, (c) EXP9 . . . . .	40
6	Assimilação com observações distribuídas em diferentes arranjos: (a) EXP10, (b) EXP11, (c) EXP12. . . . .	42

## LISTA DE TABELAS

1	Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen (GRYNING et al., 1987). . . . .	34
2	Erro Relativo aos Experimentos 1, 2, 3, 4, 5 e 6. . . . .	38
3	Erro para diferentes números de sensores na direção-z. . . . .	38
4	Erro para três arranjos de observações na direção-z. . . . .	41

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

$3DVAR$	método variacional tridimensional
$4DVAR$	método variacional quadridimensional
$C$	concentração de um poluente
$\mathbf{d}_n$	incremento de análise
$EDO$	Equação Diferencial Ordinária
$EKF$	<i>extended Kalman filter</i>
$EnKF$	<i>ensemble Kalman filter</i>
$EnSRF$	<i>ensemble square root filter</i>
$ETKF$	<i>ensemble transform Kalman filter</i>
$F$	matriz do modelo matemático de previsão
$FS$	desvio fracional padrão
$G_k$	matriz de ponderação ou matriz de ganho
$h$	altura da camada limite convectiva
$H$	operador de transformação
$H_f$	altura da fonte
$I$	matriz identidade
$J(.)$	função custo
$k$	constante de von-Kármán
$K_z$	coeficiente de difusão turbulenta na direção $z$
$KF$	<i>Kalman filter</i>
$L$	comprimento de Monin-Obukhov
$LEKF$	<i>local ensemble Kalman filter</i>
$MFB$	viés fracional médio
$NMSE$	erro quadrático médio normalizado
$RN$	rede(s) neural(is)
$\bar{u}$	componente média do escoamento na direção $x$

$u_*$	velocidade de fricção
$V_g$	velocidade de deposição
$w_n$	vetor de estado do modelo no passo de tempo $t_n$
$w_*$	escala de velocidade convectiva vertical
$x$	componente longitudinal
$z$	componente vertical
$z_0$	rugosidade do terreno
$\sigma$	desvio padrão
$\tau_0$	tensão de cisalhamento
$\psi_m$	função estabilidade

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>18</b>
2.1	Modelo Matemático	18
2.2	Assimilação de Dados	19
2.3	Objetivos	22
<b>3</b>	<b>KALMAN FILTER</b>	<b>23</b>
3.1	Mínimos Quadrados	23
3.2	Mínimos Quadrados Ponderados	24
3.3	Escolha dos Pesos ( $\theta$ )	25
3.4	Mínimos Quadrados Recursivos	26
3.5	<i>Kalman filter</i>	28
<b>4</b>	<b>DADOS PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO</b>	<b>33</b>
4.1	Dados Experimentais	33
4.1.1	Experimento de Copenhagen (Dinamarca)	33
4.2	Coeficiente de Difusão e Perfil de Vento	34
<b>5</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>36</b>
5.1	Avaliação 1 - Assimilação dos Dados do Experimento de Copenhagen	36
5.2	Avaliação 2 - Assimilação de dados Sintéticos com Diferentes Distribuições no Domínio ( $x,z$ )	37
5.2.1	Diferentes frequências de observação na direção- $x$	38
5.2.2	Diferentes números de sensores na direção- $z$	38
5.2.3	Diferentes arranjos de 5 sensores ao longo da direção- $z$	41
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>43</b>
	REFERÊNCIAS	44

# 1 INTRODUÇÃO

Fontes naturais e antropogênicas de poluição tem causado grande impacto no meio ambiente. Ao contrário das antropogênicas (por exemplo, emissões industriais e automotivas), as causas naturais, tais como erupções vulcânicas de  $SO_2$ , não podem ser controladas pelo ser humano. Após a revolução industrial, tem havido um aumento na poluição atmosférica, tal que a poluição do ar nas grandes cidades tem se tornado um problema de saúde pública.

Enquanto os níveis de poluição natural podem ser considerados constantes no tempo (embora no passado grandes erupções vulcânicas tenham modificado o clima por um certo período), os níveis de poluição ocasionada pelo homem estão em contínuo aumento. Enquanto que sobre poluição natural não existe, em geral, nenhum controle, a poluição antropogênica pode ser controlada. São muitos os problemas que a poluição do ar, produzida por atividades antropogênicas, ocasiona para o equilíbrio ecológico. Os gases e poeiras abandonados na atmosfera provocam efeitos negativos nas proximidades das fontes (deteriorando a qualidade do ar em regiões urbanas, agrícolas e industriais), a média ou longa distância (chuva ácida, transporte transfronteiriço) e em escala global (buraco na camada de ozônio). Se as fontes poluidoras são numerosas ou de longo tempo de emissão ou, ainda se os poluentes são suficientemente tóxicos, os prejuízos ocasionados ao equilíbrio ecológico serão certamente consideráveis. Devido aos problemas ocasionados pela poluição do ar, é necessário estudar e entender o processo de dispersão de poluentes para prever as possíveis conseqüências do impacto ambiental sobre os diversos ecossistemas.

Tradicionalmente os movimentos atmosféricos e os fenômenos relacionados têm sido classificados de acordo com suas dimensões horizontais em três categorias: macroescala, mesoescala e microescala. Os movimentos de macroescala tem uma escala de comprimento horizontal da ordem de 1000 *km* ou maior (mas limitado pela circunferência da Terra) e escala de tempo de um dia ou mais. Na vertical, os movimentos de macroescala podem se estender por toda a troposfera<sup>1</sup>. No outro extremo, os movimentos de microescala tem um comprimento horizontal de 5 *km* ou menos e escala de tempo da ordem de uma hora ou menos. A escala

---

<sup>1</sup>A troposfera é a região da atmosfera que vai desde a superfície até cerca de 11 *km* de altura. Está dividida em duas partes: uma camada adjacente à superfície, chamada de Camada Limite Planetária (CLP), e a camada acima desta, que é denominada Atmosfera Livre (STULL, 1988).

vertical é limitada pela profundidade da Camada Limite Planetária (CLP)<sup>2</sup>, Camada de Mistura, nuvens convectivas, ou qualquer outro sistema com o qual eles possam estar associados. A micrometeorologia é o estudo de tais fenômenos de pequena escala e, é a área de interesse neste trabalho.

A micrometeorologia sempre confiou muito em experimentos de campo para aprender mais sobre a camada limite (STULL, 1988). Na década de 1950 foram realizadas as primeiras medidas simultâneas de concentração, parâmetros de dispersão da pluma e variáveis meteorológicas na tentativa de encontrar relações empíricas entre a difusão atmosférica e os fatores meteorológicos. O experimento mais importante foi o de Prairie Grass realizado nos Estados Unidos descrito no trabalho de Barad (1958). Outro experimento de repercussão internacional ocorreu na década de 1980 em Copenhague, o qual é apresentado no artigo de Gryning (1981). Estes experimentos determinaram o campo de concentração na superfície terrestre a uma distância de 50 a 6000 metros a partir da fonte (Prairie-Grass de 50 a 800 *m* e Copenhague até 6000 *m*). Muitos outros experimentos foram realizados em várias partes do mundo e alguns deles podem ser encontrados em: Bowne; Londergan (1981), Gryning; Lyck (1984), Doran; Horst (1985) e Silversten; Böhler. O grande problema é que as observações de campo são muitas vezes dificultadas por problemas operacionais e pelos altos custos envolvidos.

Os modelos matemáticos são um instrumento particularmente útil no entendimento dos fenômenos que controlam o transporte, a dispersão e a transformação físico-química dos poluentes imersos na atmosfera. Estes modelos, que permitem uma validação do nível observado de poluentes e a causa efeito das emissões, podem ser utilizados para evitar eventos críticos de poluição, discriminar os efeitos de várias fontes e de vários poluentes, estimar o impacto de novas fontes, e, da mesma forma, validar o estado da qualidade do ar em um determinado lugar. Para determinar a concentração de poluentes na atmosfera existem duas abordagens matemáticas para simular numericamente esses fenômenos: Euleriano e Lagrangiano. A principal diferença entre os dois modelos é que o sistema de referência Euleriano é fixo em relação à Terra, enquanto o Lagrangiano segue a velocidade instantânea do fluido (ANFOSSI, 2005). Neste trabalho utiliza-se o modelo Euleriano.

Na estimativa do campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera, emprega-se, normalmente, a equação de advecção-difusão, que é obtida a partir da parametrização dos fluxos turbulentos na equação da continuidade de movimento, sendo que os modelos Eulerianos de dispersão têm como característica a solução desta. Sob certas condições, pode-se obter expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão da pluma (PASQUILL; SMITH, 1983).

Modelos de equações primitivas tridimensionais não tem soluções analíticas, portanto a previsão operacional de dispersão de poluentes utiliza modelos numéricos de equações primitivas, por sua vez, dependentes das condições iniciais, conhecidas no jargão por análise objetiva (KALNAY, 2003). Na construção da análise, podem ser utilizadas técnicas de assimilação de

---

<sup>2</sup>Também chamada de Camada Limite Atmosférica (STULL, 1988).

dados com o objetivo de combinar um campo a priori, em geral oriundo de modelagem do escoamento, chamado "*background*" com dados observacionais obtidos direta ou remotamente. Atualmente, utilizam-se previsões numéricas como *background* ou informação *a priori*. Estas previsões apresentam incertezas devido a insuficiência física representadas pelas equações do modelo em relação a realidade do escoamento atmosférico e pela aproximação numérica empregada na solução das equações diferenciais acopladas. As observações apresentam erros de diferentes causas, dentre as quais, a limitação de precisão dos instrumentos, de calibração, de exposição, falhas, etc. Assimilação de dados é um procedimento no qual se combina previsão de curto prazo com observações para a construção da análise, considerando-se o conhecimento da estatística dos erros de previsão e observação. Os estados da arte em assimilação de dados incluem os métodos variacionais tridimensionais (3DVAR) e quadridimensionais (4DVAR) e aplicação do *Kalman filter* (KF) com suas variantes (KALNAY, 2003).

Todavia, mesmo que os modelos fossem perfeitos e as observações exatas, a natureza caótica do sistema impediria que a previsão fosse exata (100 % de acertos). Além disso, a assimilação de dados em modelos atmosféricos tem a dificuldade associada ao número de graus de liberdade dos modelos. Contudo, simplificações nos métodos associados a alta dimensão do sistema tornam-se menos importantes, à medida que a capacidade computacional aumenta.

Os métodos de assimilação de dados como relaxação newtoniana, interpolação ótima (IO), métodos variacionais e *ensemble Kalman filter* (DALEY, 1991), podem ser descritos como procedimentos que usam dados observacionais para melhorar uma previsão feita por um modelo matemático impreciso. A assimilação pode ser descrita como um processo de dois passos:

$$\text{Passo de previsão: } \mathbf{C}_n^p = F[\mathbf{C}_{n-1}^a]$$

$$\text{Passo de análise: } \mathbf{C}_n^a = \mathbf{C}_n^p + \mathbf{d}_n$$

onde  $\mathbf{C}_n$  representa o vetor de estado do modelo no passo  $x_n$ ,  $F[.]$  é o modelo matemático de previsão, os sobre índices  $p$  e  $a$  denotam respectivamente os valores preditos e analisados, finalmente  $\mathbf{d}_n$  é o incremento da análise. O vetor incremento de análise é calculado como sendo um produto entre uma matriz de ponderação e uma função que mede a discrepância entre a previsão do modelo e as observações:

$$\mathbf{d}_n = -G_n f(\mathbf{C}_n^o - \mathbf{C}_n^p)$$

sendo  $G_n$  a matriz de ponderação (ou matriz de ganho, como é chamado em *Kalman filters*). Esta matriz é calculada por um estimador na técnica de IO, o estimador poderá ser mínimos quadrados ou máxima variância; ou por uma fórmula envolvendo a matriz de covariância, como na técnica do KF; ou pode ser parametrizada, por exemplo  $G_n = \alpha_n I$ , onde  $\alpha_n$  é um parâmetro que varia com o tempo. Esta parametrização é usada, por exemplo, em métodos variacionais de assimilação.

A função de discrepância assume formas diferentes para cada método de assimilação:

$$f(w_n^o - w_n^p) = \begin{cases} w_n^o - H_n w_n^p & (\text{Kalman filter e Interpolação ótima}) \\ \nabla J(w_n^p - w_n^o) & (\text{Método variacional}) \end{cases}$$

onde a função custo  $J(w_n^p - w_n^o)$  é dada por:

$$J(w_n^p - w_n^o) = \frac{1}{2} (w_n^p - w_n^o)^T \theta (w_n^p - w_n^o) .$$

O novo método de assimilação de dados baseado em RN pode ser descrito como

$$w_n^a = F_{RN}(w_n^p, w_n^o)$$

onde  $F_{RN}$  representa a RN. Resultados com esta técnica são apresentados em: Härter; Campos Velho (2005a), Härter et. al. (2004) e Härter; Campos Velho (2005b).

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 Modelo Matemático

É crescente nos últimos anos o interesse pela solução da equação de advecção-difusão de maneira analítica. As soluções analíticas levam em conta explicitamente todos os parâmetros de um problema, de modo que suas influências podem ser confiavelmente investigadas e é possível facilmente obter-se o comportamento assintótico da solução, que, por vezes, é difícil gerar via cálculos numéricos.

A primeira solução analítica da equação de advecção-difusão é conhecida como a solução Gaussiana. Neste tipo de solução, o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são considerados constantes com a altura, e são utilizadas as condições de contorno de fluxo nulo de poluentes na parte inferior e superior da camada limite planetária (CLP):

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = 0, \quad \text{e} \quad z \rightarrow \infty \quad (1)$$

A partir da solução Gaussiana, surgiram na literatura os modelos não Gaussianos, ou seja, o campo de vento e o coeficiente de difusão são variáveis com altura.

Em 1923, Roberts apresentou uma solução bidimensional para fontes superficiais, nos casos em que a velocidade do vento e o coeficiente de difusão vertical  $K_z$  ( $m^2/s$ ) seguem leis de potência como uma função da altura. Isto é:

$$\bar{u} = \bar{u}_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^m ; \quad K_z = K_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^n \quad (2)$$

sendo  $z_1$  a altura na qual  $\bar{u}_1$  e  $K_1$  são analisados,  $m$  é um expoente que está relacionado com a instabilidade atmosférica e  $n$  está relacionado com a rugosidade da superfície, os expoentes variam entre 0 e 1 (IRWIN, 1979).

Em Scruen; Fisher (1975), é apresentada a solução com  $\bar{u}$  constante e  $K_z$  como:

$$K_z \equiv z \quad \text{para} \quad 0 \leq z \leq z_t \quad \text{e} \quad K_z = K_z(z_t) \quad \text{para} \quad z_t \leq z \leq h \quad (3)$$

na qual  $z_t$  ( $m$ ) é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada superficial). Esta

solução permite (como condições de contorno) um fluxo líquido de material para o solo:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = V_g \bar{c} \quad (4)$$

em que  $V_g$  é a velocidade de deposição ( $m/s$ ). A solução de Scriven; Fisher (1975) tem sido amplamente usada no Reino Unido para o transporte de longa escala de poluentes.

Vários outros autores apresentaram soluções simplificadas para a equação de advecção-difusão, no geral com coeficientes de difusão e perfil de vento constantes ou assumindo um perfil linear ou potência. Podemos citar: Rounds (1955), Smith (1975a), Smith (1975b), Fisher (1975)(FISHER, 1975), Yeh; Huang (1975), Berlyand (1975) , Demuth (1978), Tirabassi et. al. (1986), Tirabassi et. al. (1989), Tirabassi; Rizza (1992), Tirabassi; Rizza (1993), van Ulden (1978) , Tirabassi; Rizza (1995)(TIRABASSI; RIZZA, 1995), Nieuwstadt (1980) , Nieuwstadt; Haan (1981), Catalano (1982), Sharan et. al. (1996a), Sharan et. al. (1996b), Lin; Hildeman (1997), Brown et. al. (1997).

Mais recentemente surgiram modelos que levam em conta coeficientes de difusão e perfil de vento variáveis e mais complexos, representando de uma forma mais realística o fenômeno físico.

## 2.2 Assimilação de Dados

A literatura sobre Assimilação de Dados (AD) pode ser dividida em duas classes. A primeira trata sobre a avaliações do impacto dos métodos de assimilação no sistemas meteorológicos simulados por modelos de equações primitivas e a segunda trata da avaliação das técnicas de AD em modelos conceituais, tais como Água Rasa e Lorenz. O segundo caso é de maior interesse para este texto. Em Miller et. al. (1994), é aplicado ao modelo de Lorenz, o *extended Kalman filter* (EKF), versão do KF para problema não-lineares. Os autores concluíram que a assimilação apresenta bons resultados para frequências de observação relativamente altas, considerando-se o EKF com primeiro e segundo momento estatístico. Ao utilizarem terceiro e quarto momento, formulação de Monte Carlo, a trajetória é muito bem corrigida pela inserção do dado. Em Huang; Yang (1996) é avaliado o procedimento de assimilação com as equações de Lorenz e o método de assimilação 4DVAR. Os autores mostram que quanto maior for o ruído na condição inicial (CI), maior deve ser o número de interações durante a minimização do gradiente da função custo. Os autores concluem também, que com observações de apenas uma das três variáveis do sistema e 40% de ruído na CI, a trajetória do modelo não é corrigida pela assimilação. Em Mogensen; Huang (1998), a capacidade do método 3DVAR estimar parâmetros do modelo de Lorenz é explorada e são apresentados resultados a cerca de variações na janela de assimilação e ruído nos dados observados. Os autores concluem que a estimativa de parâmetros é uma aplicação promissora para a abordagem variacional.

Em 2005, Miyoshi investigou variações do *ensemble Kalman filter* (EnKF), apresentando

as seguintes conclusões baseadas no sistema de Lorenz: (1) calculando a covariância do erro de observação de maneira localizada (multiplicando a covariância do erro de observação pelo inverso de uma gaussiana) é possível assimilar maior número de observações; (2) A performance do *local ensemble Kalman filter* (LEKF) é igual ou melhor do que a do *ensemble square root filter* (EnSRF) com parâmetros similares; (3) ponderar a covariância em função do tempo e local é uma proposta promissora em assimilação de dados.

Em Hayden et. al. (2011) é destacado a desejável característica de rápida convergência do algoritmo 3DVAR em aplicações ao modelo de Lorenz tanto para o caso discreto como para o caso contínuo.

Em Law et. al. (2014) é estudado a performance do 3DVAR e tido como conclusão que a metodologia de inflação de variância (por fator multiplicativo) tende a estabilizar o filtro, condicionando a convergência do algoritmo de minimização e melhorando a precisão da correção das trajetórias do escoamento. Em Härter; Campos Velho (2008) é emulado o EKF através de redes neurais artificiais, com o objetivo de mostrar que no caso sobredeterminado (quando o número de observações é maior do que o número de graus de liberdade do modelo), a técnica de inteligência artificial é uma alternativa às demais técnicas. A implementação original do KF é inviável em problemas de alta dimensão, tais como previsão numérica de tempo operacional. Entretanto, sua aplicação através de diversas simplificações como *ensemble Kalman filter* - EnKF (EVENSEN, 1994), (BURGERS; LEEUWEN; EVENSEN, 1998), (WHITAKER; HAMIL, 2002), (TIPPET et al., 2003); *ensemble transform Kalman filter* - ETKF (BISHOP; ETHERTON; MAJUMDAR, 2001), *ensemble adjustment Kalman filter* EAKF (ANDERSON, 2001), *local ensemble Kalman filter* - LEKF (OTT et al., 2002), *hybrid* EnKF-3DVAR (GAO; XUE; STENSRUD, 2013) é possível devido a redução da complexidade computacional destas técnicas.

Em Evensen (1994) apresenta-se um método sequencial baseado na abordagem de Monte Carlo. Esta metodologia mostra-se atrativa para tratar problemas de alta dimensão, cuja covariância dos erros demanda alta capacidade computacional, como no EKF. Segundo o autor, aplicações deste EnKF em fronteiras abertas, como aplicações a oceanos, podem ser tratadas como problemas bens postos. Os resultados mostram que os crescimento dos erros é evitado, porque não há a necessidade do armazenamento e evolução da matriz de covariância dos erros. O método proposto pode ser aplicado a modelos oceânicos realísticos com amplo domínio em computadores atuais de alta performance ou em *cluster* de *Workstations*.

Em Bishop et. al. (2001) avalia-se um *Kalman filter* sub-ótimo, conhecido como ETKF, onde é feita uma transformação e normalização no *ensemble*, para obter-se a matriz de covariância dos erros de previsão menos custosa computacionalmente em comparação com o EnKF. O filtro foi usado pelo Centro Nacional de Previsão Ambiental nas missões de reconhecimento, *Winter Storm* de 1999 e 2000, para determinar onde as aeronaves devem implantar *dropwindsonde* a fim de melhorar as previsões de 24-72h sobre áreas continentais dos Estados Unidos. Esta metodologia também é testada através de um modelo numérico barotrópico

de previsão de vórtices ciclônicos tropicais. Comparações entre ETKF, 3DVAR e métodos híbridos mostram que são eficientes para AD.

O EAKF, apresentado no trabalho de Anderson (2001) consiste em uma teoria para estimar a distribuição de probabilidade do estado de um modelo dado um conjunto de observações existentes. O EAKF, bem como o EnKF original geram previsões com erros relativamente pequenos na média dos conjuntos, o que implica em razoável nível de incerteza nas variáveis assimiladas. Nos experimentos deste trabalho, observa-se vantagens significativas do EAKF em comparação com 4DVAR em modelos de baixa ordem.

Em Ott et. al. (2002) os autores introduzem o conceito de *localization* na formulação do *ensemble Kalman filter*, chamado LEKF. Esta aproximação baseia-se na hipótese de que, quando a superfície da terra é dividida em regiões localizadas de tamanho moderado, os vetores das incertezas de previsão em tais regiões tendem a estar em um subespaço de dimensão muito menor do que a do completo vetor de estado atmosférico de tal região. Conjuntos de filtros de Kalman, em geral, assumem que a análise resultante da assimilação de dados encontra-se no mesmo subespaço com o erro de previsão esperado. Sob esta hipótese a dimensão deste subespaço é baixa. Isto implica que as operações com matrizes tridimensionais são relativamente baixas. Assim, a análise de dados é feita localmente de forma que se pode explorar as técnicas de computação massivamente paralela para a redução de custo computacional. As análises locais são, então, utilizadas para construir estados globais para o avanço para o próximo tempo de previsão. As potencialidades do método são ilustradas através de experimentos com o modelo de Lorenz-96, que permitiu aos autores concluir que se pode obter uma análise precisa a um custo computacional menor do que com o *ensemble Kalman filter* original, onde as observações são utilizadas de maneira não localizada.

Pesquisas em AD aplicadas a dispersão de poluentes são mais recentes do que as tradicionais aplicações em atmosfera e oceano, porém igualmente importantes. À medida que aumenta a rede de observações de poluentes na troposfera, a AD em modelos de química da atmosfera é desenvolvida. Em seu trabalho de 2007, Constantinescu destaca o progresso no desenvolvimento de técnicas variacionais aplicadas com esta finalidade e mostra experimentos de AD bem sucedidos e promissores para o sudeste da África com o EnKF.

Em Emili et. al. (2011), com o objetivo de melhorar os campos de PM<sub>10</sub> sobre a Suíça e Itália, são integradas observações de perfis verticais de satélite com observações de superfície através do EKF. Os autores avaliaram a precisão dos campos gerados pela AD comparando os mesmos com o campo de *background* (modelo). Verificou-se que os dados de satélite são de benefício limitado na região considerada, devido à boa cobertura espacial das redes terrestres e as dificuldades inerentes aos dados de retrieval de PM<sub>10</sub> sobre topografia acidentada. Os resultados da assimilação são encorajadores quando 80% de observações de superfície são excluídas. Os autores concluíram que dados de satélite são de maior interesse para as regiões com uma distribuição esparsa dos locais de medição (por exemplo, a distância > 100 km entre sites).

Em Barbu et. al. (2011) é destacado que o material particulado (PM) é muito importante para a saúde humana e esta diretamente relacionado com o clima. Todavia, o desempenho dos modelos de química de transporte de PM e seus gases precursores tem "*skill*" relativamente baixo. Portanto, propõem assimilação de sulfato e seu gás precursor (dióxido de enxofre) no modelo de transporte químico (LOTOS-EUROS) usando EnKF. Os autores concluíram que a assimilação de dados sequencial para a estimativa de dióxido de enxofre e sulfato sobre o território Europeu tem resultados razoáveis. Contudo, um experimento mostrou que o filtro pode forçar o modelo para soluções irreais. Os autores sugerem que a assimilação simultânea de múltiplos poluentes implica em resultados mais realísticos.

## 2.3 Objetivos

O Objetivo inicial deste trabalho é modelar a CLP para condições instáveis e assimilar, através do EKF, os dados coletados no experimento de Copenhagen. Para tanto consider-se-á a solução da equação de advecção-difusão bidimensional. Ratifica-se a importância da assimilação de dados em modelos de química da atmosfera e se avalia a performance do EKF aplicado o problema de estimativa de concentração de poluentes em questão. Como o experimento de Copenhagen, para a modelagem estudada, fornece dados apenas para camada próxima a superfície terrestre em apenas três distâncias da fonte, realizam-se experimentos assimilando-se dados sintéticos. O objetivo específico é avaliar a assimilação de dados sintéticos com diferentes amostragens na coordenada horizontal ( $x$ ) e com diferentes distribuições nos níveis verticais do modelo através do erro quadrático médio (EQM). Para atingir o objetivo proposto, o trabalho é organizado da seguinte maneira:

No capítulo 3, será apresentado o método de assimilação de dados KF. Já no Capítulo 4, serão descritos os dados para a validação do modelo que consiste nos experimento de Copenhagen e as parametrizações da turbulência e perfil de vento. No capítulo 5 são apresentados os resultados obtidos. Encontram-se no Capítulo 6 as conclusões deste assunto.

### 3 KALMAN FILTER

Segundo Sorenson (1970) o conceito de Gauss de teoria de estimação por mínimos quadrados, originalmente estimulado por estudos astronômicos, tem sido a base para o estudo de técnicas de teoria de estimação nos últimos 170 anos, provavelmente nenhuma tão útil em relação às necessidades atuais como o *Kalman filter* (KF).

O KF, embora tenha sua origem nos mínimos quadrados (MQ), como verifica-se na afirmação de Sorenson, tem sido utilizado em estudos de poluição atmosférica (ZHANG; HE-EMINK; EIJKEREN, 1997), Oceanografia (MILLER; GUIL; GAUTIEZ, 1995) e meteorologia (DALEY, 1991), no contexto de assimilação de dados.

Como esta tese trata de assimilação de dados, que por vezes é um problema de estimação, reserva-se este capítulo ao KF, técnica emulada pelas RN. Por motivos evidentes na afirmação de Sorenson (1970), revisa-se os mínimos quadrados (MQ), mínimos quadrados ponderados (MQP) e mínimos quadrados ponderados com recursividade (MQR). Maneiras alternativas de dedução das equações do KF são obtidas em Anderson; Moore (1979).

#### 3.1 Mínimos Quadrados

Um sistema  $\mathbf{H}\mathbf{w} = \mathbf{z}$  mal condicionado não pode ser resolvido diretamente por  $\mathbf{w} = \mathbf{H}^{-1}\mathbf{z}$ , portanto uma alternativa para estimar os parâmetros  $\mathbf{w}$  com as observações  $\mathbf{z}$  é minimizar  $\|\mathbf{H}\mathbf{w} - \mathbf{z}\|$ , onde  $H$  é o operador que transforma  $\mathbf{z}$  em  $\mathbf{w}$ . Para tal, considera-se o seguinte modelo linear e erro de observação

$$\mathbf{z} = \mathbf{H}\mathbf{w} + \varepsilon \quad (5)$$

$$\varepsilon = \mathbf{z} - \mathbf{H}\mathbf{w} \quad (6)$$

A solução deste sistema consiste em minimizar o erro  $\varepsilon$  de forma a se obter a melhor estimativa ( $\hat{\mathbf{w}}$ ) do estado  $\mathbf{z}$ , segundo o critério quadrático, o que pode ser obtido minimizando-se o seguinte funcional  $J(\mathbf{w})$  em relação a  $\mathbf{w}$

$$J(\mathbf{w}) = \varepsilon^T \varepsilon = \|\varepsilon^2\| \quad (7)$$

onde  $\varepsilon^T$  é dado pela equação (6) e usando a propriedade  $(AB)^T = B^T A^T$ , obtém-se

$$J(\mathbf{w}) = \mathbf{w}^T \mathbf{H}^T \mathbf{H} \mathbf{w} - \mathbf{w}^T \mathbf{H}^T \mathbf{z} - \mathbf{z}^T \mathbf{H} \mathbf{w} + \mathbf{z}^T \mathbf{z}. \quad (8)$$

Como  $\mathbf{z}^T \mathbf{H} \mathbf{w}$  é igual a  $\mathbf{w}^T \mathbf{H}^T \mathbf{z}$ , pois neste caso a ordem dos vetores é irrelevante para o cálculo do produto interno, a derivada primeira de  $J(\mathbf{w})$  em relação a  $\mathbf{w}$  resulta na seguinte expressão

$$\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{z} \quad (9)$$

onde o símbolo  $(\hat{\cdot})$  foi introduzido para representar estimativa. Assim, verifica-se que o vetor  $\mathbf{w}$  que minimiza  $\|\mathbf{H}\mathbf{w} - \mathbf{z}\|_2^2$ , é a solução da equação normal  $\mathbf{H}^T \mathbf{H} \mathbf{w} = \mathbf{H}^T \mathbf{z}$ , sendo o vetor  $\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{z}$  a solução por mínimos quadrados para  $\mathbf{H}\mathbf{w} = \mathbf{z}$

Pela interpretação geométrica, verifica-se que  $\mathbf{H}\mathbf{w}$  é a projeção de  $\mathbf{z}$ , ou seja, o vetor mais próximo de  $\mathbf{z}$  entre todos os vetores  $\mathbf{H}\mathbf{w}$  possíveis. Algebricamente a solução por mínimos quadrados pode ser obtida multiplicando-se  $\mathbf{H}\mathbf{w} = \mathbf{z}$  por  $\mathbf{H}^T$ , resultando na matriz quadrática  $\mathbf{H}^T \mathbf{H}$ ; obtendo-se  $n$  equações para os desconhecidos  $w_1, \dots, w_n$ . Assumindo-se que a matriz  $\mathbf{H}$  tem posto cheio (*full rank*, todas as suas colunas são independentes), tal que  $\mathbf{H}^T \mathbf{H}$  possui inversa e  $\mathbf{z}$  é completamente determinado.

Em aplicações práticas não é usual estimar  $\mathbf{w}$  pela equação (9) devido às dificuldades numéricas na inversão de  $\mathbf{H}^T \mathbf{H}$ , e sim através de algoritmos estáveis (ver Golub e van Loan (1989)(GOLUB; LOAN, 1983)).

## 3.2 Mínimos Quadrados Ponderados

Para os MQP, considera-se o caso em que as medidas  $\mathbf{z}$  não têm a mesma precisão, ou seja, supondo-se que a medida  $z_1$  seja mais precisa do que a medida  $z_2$ , é natural atribuir maior peso para  $z_1$ . Assim, ao invés de minimizar o erro médio quadrático  $\|\varepsilon^2\|$ , minimiza-se o erro médio quadrático dado por  $\|\theta \varepsilon^2\|$ , ou seja, encontra-se a melhor solução por mínimos quadrados que minimiza  $\theta \mathbf{H}\mathbf{w} = \theta \mathbf{z}$ , obtendo-se

$$\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{C} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{C} \mathbf{z} \quad (10)$$

onde  $\mathbf{C} = \theta^T \theta$ . Fazendo-se

$$\mathbf{L} = (\mathbf{H}^T \mathbf{C} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{C}, \quad (11)$$

tem-se

$$\hat{\mathbf{w}} = \mathbf{L} \mathbf{z} \quad (12)$$

Para  $\theta = \mathbf{I}$ , tem-se os MQ padrão. Quando as medidas não são correlacionadas, a matriz de pesos  $\theta$  é diagonal, caso contrário é uma matriz cheia.

### 3.3 Escolha dos Pesos ( $\theta$ )

Aqui, tratar-se-á ( $\theta$ ) como propriedades estatísticas do experimento. Para calcular ( $\theta$ ), primeiro assume-se que o ruído de observação  $\varepsilon = \mathbf{z} - \mathbf{H}\mathbf{w}$  é não tendencioso (sem viés). O valor esperado <sup>1</sup> é dado por  $\mathbf{E}[\varepsilon_i]$  e a variância por  $\mathbf{E}[\varepsilon_i^2]$ . Apenas o desvio padrão (raiz quadrada da variância) é necessário para determinar os pesos nos mínimos quadrados. Em outras palavras, tendo apenas uma medida e conhecendo apenas o primeiro e o segundo momentos, média e variância respectivamente, determinam-se as propriedades dos pesos nos mínimos quadrados, ou seja, assumindo uma distribuição gaussiana, não é necessário conhecer a distribuição de probabilidade completa. Havendo mais do que uma medida, é necessário conhecer a dependência mútua entre os ruídos, a qual é medida pela sua covariância.

Para ruídos independentes, o que é mais comum na prática, a covariância é nula. Os pesos  $\theta$  são dados por  $\theta_i = 1/\sigma_i$  (o que significa que quanto menor for a variância  $\sigma_i$ , mais confiáveis são as observações e maiores os pesos  $\theta_i$ ). Observa-se que  $\theta$  e  $\mathbf{C} = \theta^T\theta$ , são diagonais,  $\mathbf{C}$  contém os números  $1/\sigma_i$  e no caso em que as variâncias forem todas iguais, tem-se os mínimos quadrados.

Como  $\mathbf{C}$  torna o estimador por mínimos quadrados ponderados o "melhor estimador", pode-se definir uma matriz de covariância dos erros de observação (nas medidas)  $\mathbf{R}$ , tal que  $\mathbf{C} = \mathbf{R}^{-1}$ .

Os elementos  $r_{ii}$  de  $\mathbf{R}$  são dados pelas variâncias  $\mathbf{E}[\varepsilon_i^2]$  e os elementos fora da diagonal são dados por  $\mathbf{E}[\varepsilon_i\varepsilon_j]$ . Como os produtos  $\varepsilon_i^2$  e  $\varepsilon_i\varepsilon_j$  aparecem na matriz quadrada  $\varepsilon\varepsilon^T$ , pode-se abreviar a matriz de covariância  $\mathbf{R}$  como o valor esperado de  $\varepsilon\varepsilon^T$

$$\mathbf{R} = \mathbf{E}[\varepsilon\varepsilon^T]. \quad (13)$$

Procura-se  $\mathbf{C}$  tal que  $\mathbf{E}[\varepsilon_i] = 0$  (o melhor possível). Para tanto, o estimador  $\hat{\mathbf{w}}_w = \mathbf{L}\mathbf{z}$ , que estima o verdadeiro, mas desconhecido parâmetro  $\mathbf{w}$  das medidas  $\mathbf{z}$ , deve ser linear e não tendencioso. Será linear se  $\mathbf{L}$  for uma matriz e não tendencioso se o valor esperado do erro de estimativa for zero, ou seja:

$$\mathbf{E}[\mathbf{w} - \hat{\mathbf{w}}] = \mathbf{E}[\mathbf{w} - \mathbf{L}\mathbf{z}] = \mathbf{E}[\mathbf{w} - \mathbf{L}(\mathbf{H}\mathbf{w} + \varepsilon)] = \mathbf{E}[(\mathbf{I} - \mathbf{L}\mathbf{H})\mathbf{w}] = 0. \quad (14)$$

de onde se deduz que  $\mathbf{L}$  é não tendencioso se  $\mathbf{L}\mathbf{H} = \mathbf{I}$ .

Usando a suposição, primeiramente feita por Gauss de que a matriz  $\mathbf{C}$  deve ser o inverso da matriz de covariância  $\mathbf{R}$  ( $\mathbf{C} = \mathbf{R}^{-1}$ ) e fazendo  $\mathbf{L} = \mathbf{L}_0$ , tem-se da equação (11) que

$$\mathbf{L}_0 = (\mathbf{H}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{H})^{-1}\mathbf{H}^T\mathbf{R}^{-1} \quad (15)$$

o qual se supõe ser a escolha ótima, pois satisfaz  $\mathbf{L}_0\mathbf{H} = \mathbf{I}$ .

---

<sup>1</sup> $E[g(x)] = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)p(x) dx$ , sendo  $p(x)$  a função de densidade de probabilidade associada à variável  $x$ .

O melhor estimador linear não tendencioso (BLUE), é tal que  $\mathbf{C} = \mathbf{R}^{-1}$ . O estimador  $\hat{\mathbf{w}}$  e a matriz ótima  $\mathbf{L}_0$  satisfazem

$$\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{z} = \mathbf{L}_0 \mathbf{z}. \quad (16)$$

Esta escolha minimiza o erro esperado na estimativa, medida pela matriz de covariância do erro de estimativa  $\mathbf{P}$ , dado por

$$\mathbf{P} = \mathbf{E}[(\mathbf{w} - \hat{\mathbf{w}})(\mathbf{w} - \hat{\mathbf{w}})^T] \quad (17)$$

Estimar  $\mathbf{w}$  ótimo é equivalente a obter  $\mathbf{P}$  mínimo, portanto minimiza-se a expressão (17), que substituindo o valor de  $\hat{\mathbf{w}}$  fica

$$\mathbf{E}[(\mathbf{w} - \mathbf{LHw} - \mathbf{L}\epsilon)(\mathbf{w} - \mathbf{LHw} - \mathbf{L}\epsilon)^T]. \quad (18)$$

Desde que  $\mathbf{LH} = \mathbf{I}$  e  $\mathbf{L}$  seja linear, usando a equação (13) obtém-se

$$\mathbf{P} = \mathbf{E}[(\mathbf{L}\epsilon)(\mathbf{L}\epsilon)^T] = \mathbf{L}\mathbf{E}[\epsilon\epsilon^T]\mathbf{L}^T = \mathbf{LRL}^T \quad (19)$$

Para mostrar que  $\mathbf{L}_0$  é a escolha ótima, escreve-se  $\mathbf{L}$  como  $\mathbf{L}_0 + (\mathbf{L} - \mathbf{L}_0)$  que substituindo em  $\mathbf{P} = \mathbf{LRL}^T$ , resulta em

$$\mathbf{P} = \mathbf{L}_0 \mathbf{R} \mathbf{L}_0^T + (\mathbf{L} - \mathbf{L}_0) \mathbf{R} \mathbf{L}_0^T + \mathbf{L}_0 \mathbf{V} (\mathbf{L} - \mathbf{L}_0)^T + (\mathbf{L} - \mathbf{L}_0) \mathbf{R} (\mathbf{L} - \mathbf{L}_0)^T. \quad (20)$$

Com algumas manipulações algébricas verifica-se que a segunda e a terceira parcelas da equação (20) são nulas, portanto (20) pode ser escrita como

$$\mathbf{P} = \mathbf{L}_0 \mathbf{R} \mathbf{L}_0^T + (\mathbf{L} - \mathbf{L}_0) \mathbf{R} (\mathbf{L} - \mathbf{L}_0)^T. \quad (21)$$

Esta expressão é mínima para  $\mathbf{L} = \mathbf{L}_0$ , então a equação (21) se reduz a  $\mathbf{P} = \mathbf{L}_0 \mathbf{R} \mathbf{L}_0^T$ . Substituindo-se  $\mathbf{L}_0$  por  $\mathbf{L}$  em  $\mathbf{P} = \mathbf{LRL}^T$  obtém-se a seguinte expressão para a covariância do erro de estimativa

$$\mathbf{P} = (\mathbf{HR}^{-1}\mathbf{H})^{-1}. \quad (22)$$

Uma forma alternativa de derivação da matriz de covariância dos erros de estimativa pode ser encontrada em Mendel (1995), bem como a análise das vantagens e desvantagens em cada alternativa de derivação.

### 3.4 Mínimos Quadrados Recursivos

A seguir deduz-se a expressão do mínimos quadrados, para estimar um estado, ao passo que se dispões de novas medidas, sem a necessidade de se refazer os cálculos como todo o

conjunto de dados já disponíveis. Esta é a idéia de recursividade.

Uma outra maneira de expressar a idéia dos MQR é considerar que se pretende estimar  $w_1$  a partir da estimativa  $w_0$ , agregando a nova observação  $z_1$ .

De 16  $\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{z} = \mathbf{L}_0 \mathbf{z}$ , sendo que o erro de estimativa ( $\mathbf{w} - \hat{\mathbf{w}}$ ) tem média zero e matriz de covariância  $\mathbf{P} = (\mathbf{H} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})^{-1}$ , segundo a Equação (22).

Para calcular  $w_1$  faz-se a mesma suposição feita para calcular  $w_0$ , ou seja, a matriz  $\mathbf{C}$  que torna  $\hat{w}_1$  a melhor estimativa é  $\mathbf{C} = \mathbf{R}^{-1}$ , onde

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} R_0 & 0 \\ 0 & R_1 \end{bmatrix}, \quad (23)$$

é a matriz de covariância do erro de observação (erro nas medidas)

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_0 \\ \epsilon_1 \end{bmatrix}. \quad (24)$$

$\mathbf{R}$  é diagonal por bloco porque  $\epsilon_1$  é independente de  $\epsilon_0$ . Desta forma, a matriz  $\mathbf{H}^T \mathbf{C} \mathbf{H}$ , no cálculo de  $w_1$ , será

$$P_1^{-1} = \begin{bmatrix} H_0 & H_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_0 & 0 \\ 0 & R_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_0 & H_1 \end{bmatrix} \quad (25)$$

que desenvolvendo os produtos matriciais e usando  $P_0^{-1} = H_0^T R_0^{-1} H_0$ , resultando em  $P_1^{-1} = P_0^{-1} H_1^T R_1^{-1} H_1$ . Generalizando, obtém-se a expressão para a covariância do erro para os MQR.

$$\mathbf{P}_k^{-1} = \mathbf{P}_{k-1}^{-1} \mathbf{H}_k^T \mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{H}_k \quad (26)$$

O próximo passo é obter a equação de atualização para a estimativa  $\hat{\mathbf{w}}_{k/k}$  (estimativa no instante  $k$  dadas medidas disponíveis até o instante  $k$ ).

Lembrando que  $\hat{w}_1$  não baseia-se apenas em  $z_1$  e é o melhor estimador do sistema  $H_0 w_0 z_0$  e  $H_1 w_0 z_1$ . Desde que a equação normal seja  $\mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{w} = \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{z}$  e  $\mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} = \mathbf{P}^{-1}$ , com algumas manipulações algébricas verifica-se que  $\hat{\mathbf{w}}$  é dado por

$$\hat{w} = P_1 (H_0^T R_0^{-1} z_0 + H_1^T R_1^{-1} z_1) \quad (27)$$

Com a chegada da medida  $z_1$  há um aumento de informação. Isto faz com que  $\mathbf{P}$  diminua ( $\mathbf{P}$  é uma medida da incerteza). Nota-se que  $P_k^{-1}$  não depende das medida  $z_0$  e  $z_1$  e refere-se apenas às propriedades estatísticas de  $w_1$

Já a estimativa atual  $w_1$  baseia-se em  $z_0$  e  $z_1$ . Rearranjando a equação (27), obtém-se

$$\hat{w}_1 = \hat{w}_1 + G_1 (z_1 - z_0) \quad (28)$$

Generalizando a equação (28) obtém-se a expressão de atualização por MQR para  $\hat{\mathbf{w}}$  dadas  $\mathbf{z}_k$  medidas

$$w_k = w_{k-1} + G_k(z_k - H_k w_{k-1}). \quad (29)$$

onde  $G_k = P_k H_k^T R_k^{-1}$  é a matriz ganho,  $z_k - H_k w_{k-1}$  é a inovação e  $G_k(z_k - H_k w_{k-1})$ , refere-se a correção.

A equação (29) é uma forma eficiente da estimativa do estado  $\mathbf{w}$ , no instante  $k$ , dadas as  $z_{k-1}$  medidas, ser atualizada para uma estimativa  $\mathbf{w}$ , no instante  $k$ , dadas as  $z_k$  medidas.

Nesta seção derivou-se a expressão dos MQR (equação (29)), com a qual a estimativa de um determinado parâmetro pode ser atualizada de maneira ótima e recursiva, ao passo que se dispõe de novas medidas. Derivou-se também uma expressão (equação (26)) que quantifica a incerteza associada a esta estimativa, ou seja, a covariância do erro de estimação.

Na próxima Seção deriva-se as expressões para o KF, que fornece uma estimativa recursiva ótima para estados que mudam de acordo com a evolução de um sistema dinâmico.

### 3.5 Kalman filter

Dada a equação linear de medidas

$$\mathbf{z} = \mathbf{H}\mathbf{w} + \varepsilon \quad (30)$$

onde  $\varepsilon$  é um vetor gaussiano aleatório com média zero e matriz de covariância  $\mathbf{R}$  ( $\varepsilon = \mathbf{N}(0, \mathbf{R})$ ).

O melhor estimador  $\hat{\mathbf{w}}$  linear não tendencioso de  $\mathbf{w}$  é  $\hat{\mathbf{w}} = \mathbf{P}\mathbf{H}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{z}$ , onde  $\mathbf{P} = \mathbf{E}[(\mathbf{w} - \hat{\mathbf{w}})(\mathbf{w} - \hat{\mathbf{w}})^T] = (\mathbf{H}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{H})^{-1}$  é a covariância do erro de estimação.

Dado o seguinte sistema dinâmico com as seguintes equações para o sistema e medidas

$$w_{k+1} = F_k w_k + \eta_k \quad (31)$$

$$z_k = H_k w_k + \varepsilon_k \quad (32)$$

onde o ruído no sistema dinâmico ( $\eta_k$ ) e o ruído nas medidas ( $\varepsilon_k$ ) são vetores aleatórios gaussianos ( $\eta_k \approx N(0, Q_k)$  e ( $\varepsilon_k \approx N(0, R_k)$ ). O subíndice  $k$  refere-se ao  $k$ -ésimo instante de tempo discreto.

$\hat{w}_0$  é o melhor estimador linear não tendencioso de um estado inicial com matriz de covariância de erro  $P_0$ . O *Kalman filter* calcula o melhor estimador linear não tendencioso no tempo  $k$ , dadas as medidas  $z_0, \dots, z_k$ ; ( $w_{k/k}$ ). O filtro calcula também a matriz de covariância do erro  $P_{k/k}$  ( $\hat{w}_{k/k} - \hat{w}_k$ ) dadas estas medidas.

Os cálculos ocorrem de acordo com as fases de atualização (estimativa de  $w$  no instante  $k$  dadas  $z_k$  medidas) e propagação (estimativa de  $w$  no instante  $k + 1$  dadas  $z_k$  medidas). A seguir, aplica-se os resultados do estimador ótimo para estimar um estado e calcular a

covariância do erro de estimação nas fases de atualização e propagação.

#### Atualização

$\hat{w}_{k/k}$  é o estimador que difere do estado real  $w_k$  por um termo de erro  $e_k$  com covariância  $(P_{k/k-1})$

$$w_{k/k+1} = w_k + e_k \quad (33)$$

$$E[e_k e_k^T] = P_{k/k-1} \quad (34)$$

A nova medida  $z_k$  é relacionada com o estado  $w_k$  pela equação

$$z_k = H_k w_k + \varepsilon_k \quad (35)$$

com covariância do erro  $E[\varepsilon_k \varepsilon_k^T] = R_k$

As equações (34) e (35) podem ser agrupadas no seguinte sistema

$$\mathbf{z} = \mathbf{H}\mathbf{w} + \boldsymbol{\eta} \quad (36)$$

onde

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} \hat{w}_{k/k-1} \\ z_k \end{bmatrix} \quad (37)$$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} I \\ H_k \end{bmatrix} \quad (38)$$

$$\boldsymbol{\eta} = \begin{bmatrix} e_k \\ \eta_k \end{bmatrix} \quad (39)$$

e covariância de  $\boldsymbol{\eta}$

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} P_{k/k-1} & 0 \\ 0 & R_k \end{bmatrix} \quad (40)$$

A solução deste sistema é

$$\hat{\mathbf{w}} = \mathbf{P}\mathbf{H}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{z} \quad (41)$$

$$\mathbf{P} = (\mathbf{H}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{H})^{-1} \quad (42)$$

As equações (41) e (42) representam o estágio de atualização do FK; que são as mesmas

equações dos mínimos quadrados ponderados, que na forma recursiva resultam em

$$\hat{w}_{k/k} = \hat{w}_{k/k-1} + P_{k/k} H_k^T R_k^{-1} (z_k - H_k w_{k/k-1}) \quad (43)$$

$$P_{k/k}^{-1} = P_{k/k-1}^{-1} H_k^T R_k^{-1} H_k \quad (44)$$

onde

$$G_k = P_{k/k} H_k^T R_k^{-1} \quad (45)$$

é o ganho de Kalman.

O ganho de Kalman especifica a quantidade pela qual a inovação deve ser multiplicada (ou amplificada) para se obter o termo de correção e transformar a estimativa  $\hat{w}_k$  na nova estimativa  $\hat{w}_{k/k}$ .

#### Propagação

Desde que o novo estado seja relacionado com o estado anterior do KF, a matriz de covariância propagada é

$$P_{k+1/k} = E[(w_{k+1} - \hat{w}_{k+1/k})(w_{k+1} - \hat{w}_{k+1/k})^T]. \quad (46)$$

Abrindo a expressão acima, tem-se

$$P_{k+1/k} = E[(F_k w_k + G_k w_k - F_k \hat{w}_{k/k})(F_k w_k + G_k w_k - F_k \hat{w}_{k/k})^T]. \quad (47)$$

Desenvolvendo os produtos, usando a propriedade  $(AB)^T = B^T A^T$ , considerando  $F_k$  e  $G_k$  conhecidos e não aleatórios, lembrando que os ruídos são gaussianos não correlacionados de média nula e matriz de covariância conhecida, tem-se que

$$P_{k+1/k} = F_k P_k F_k^T + G_k Q_k G_k^T. \quad (48)$$

O KF usa uma estimativa inicial e matriz de covariância do erro inicial  $\hat{w}_{0/k-1} \cong \hat{w}_0$  e  $\hat{P}_{0/k-1} \cong \hat{P}_0$ , ambos dados como parâmetros iniciais do problema.

O algoritmo do *Kalman filter* linear, num contexto de assimilação de dados, segundo Nowosad (2001), é apresentado a seguir e ilustrado na Figura 1:

#### 1. Previsão a partir do modelo

$$\mathbf{C}_{k+1}^p = \mathbf{F}_{k+1} \mathbf{C}_k^a \quad (49)$$

$$\mathbf{P}_{k+1}^f = \mathbf{F}_k \mathbf{P}_k^a \mathbf{F}_k^T + \mathbf{Q}_k \quad (50)$$

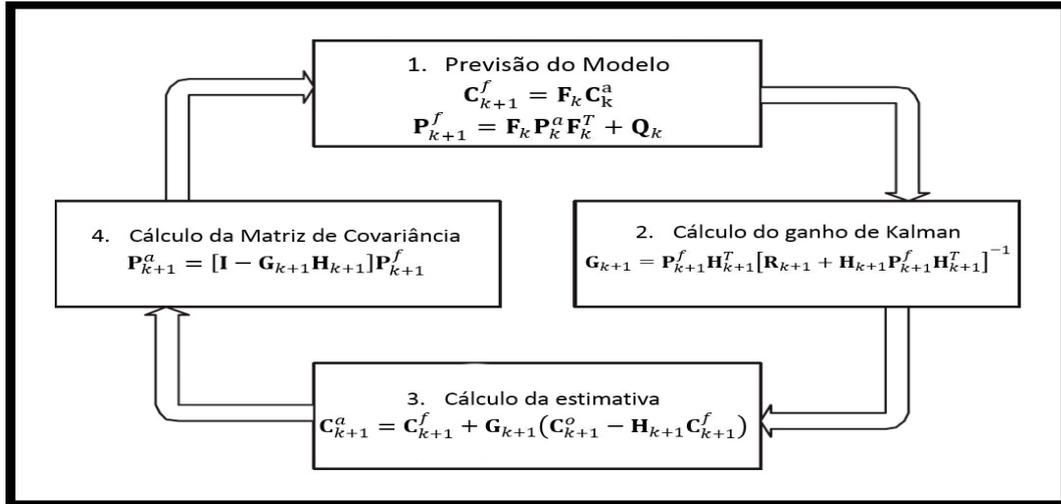


Figura 1: Diagrama esquemático do filtro de Kalman linear.

## 2. Cálculo do ganho de Kalman

$$\mathbf{G}_{k+1} = \mathbf{P}_{k+1}^p \mathbf{H}_{k+1}^T [\mathbf{R}_{k+1} + \mathbf{H}_{k+1} \mathbf{P}_{k+1}^p \mathbf{H}_{k+1}^T]^{-1} \quad (51)$$

## 3. Cálculo da estimativa

$$\mathbf{C}_{k+1}^a = \mathbf{C}_{k+1}^p + \mathbf{G}_{k+1} (\mathbf{C}_{k+1}^o - \mathbf{C}_{k+1}^f) \quad (52)$$

## 4. Cálculo da matriz de covariância

$$\mathbf{P}_{k+1}^a = [\mathbf{I} - \mathbf{G}_{k+1} \mathbf{H}_{k+1}] \mathbf{P}_{k+1}^p \quad (53)$$

O sobreíndice  $p$  (equivalente à fase de propagação) refere-se a previsão,  $o$  refere-se a observação e  $a$  (referente a fase de atualização) refere-se a assimilação.

Nas expressões acima, para aliviar a notação substituiu-se  $k + 1/k$  por  $k + 1$  e  $k/k$  por  $k$ . A expressão (51) é equivalente a (45), sendo que  $\mathbf{R}^{-1}$  é da ordem do vetor de medidas e  $[\mathbf{R} + \mathbf{H}\mathbf{P}\mathbf{H}^T]^{-1}$  é da ordem do vetor de estados. Deve-se optar por inverter a matriz de menor ordem. Para passar da expressão (45) para a expressão (51) usa-se o lema da inversão matricial. A equação (52) é obtida substituindo-se o valor do ganho de Kalman na equação (43) e a expressão (53) é obtida substituindo-se o valor de  $P^f$  em (44).

Quando aplicado a modelos não-lineares  $\mathbf{C}_{k+1}^p = \mathbf{F}_{k+1} \mathbf{C}_k^a$  (a matriz  $\mathbf{F}$  é função das variáveis de estado), lineariza-se  $\mathbf{F}$  e tem-se o *extended Kalman filter*; modificação mais usada do filtro de Kalman para problemas não-lineares.

A principal diferença entre o MQPR para o KF é que os MQPR foram desenvolvidos para parâmetros e o KF é mais genérico. Kalman trata o ruído aleatório e prova que é o melhor

estimador linear não tendencioso.

Em operações práticas de previsão de tempo e clima para a atmosfera e oceano, a matriz  $\mathbf{P}_k^p$  não é calculada por  $\mathbf{P}_{k+1}^f = \mathbf{F}_k \mathbf{P}_k^a \mathbf{F}_k^T + \mathbf{Q}_k$ , mas parametrizada baseando-se em avaliações estatísticas e vínculos dinâmicos (NOWOSAD, 2001).  $\mathbf{P}_k^p$  e  $\mathbf{P}_k^a$  também podem ser estimadas por médias de conjuntos (ensemble) (KEPPENE, 2000).

## 4 DADOS PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO

Uma utilização correta dos modelos de transporte e difusão na atmosfera não pode prescindir de um estudo sobre suas capacidades de representarem corretamente situações reais. Quando possível, deve-se verificar a confiabilidade do modelo utilizado com os dados, cenários topográficos e meteorológicos próprios da área de seu emprego (TIRABASSI, 2005).

Assim, neste capítulo, apresentam-se os dados experimentais e parametrizações do coeficiente de difusão e perfis de vento.

### 4.1 Dados Experimentais

Qualquer estudo de modelagem é incompleto se não é apropriadamente e adequadamente validado com observações relevantes. Para avaliar a performance do modelo foram utilizados dados observados do experimento de Copenhagen. A seguir é apresentado o experimento utilizado.

#### 4.1.1 Experimento de Copenhagen (Dinamarca)

Os experimentos de dispersão em Copenhagen, descritos nos artigos de Gryning et. al. (1987) e Gryning; Lyck (1984), consistiram na liberação do traçador  $SF_6$  (hexafluoreto de enxofre) ao norte de Copenhagen. É um experimento de **fonte alta e fortemente convectivo**.

O traçador foi abandonado sem empuxo a partir de uma torre com altura de 115 m, sendo coletado ao nível do solo ( $z = 0$ ), em unidades de amostragem localizadas em três arcos perpendiculares ao vento médio. As unidades de amostragem foram posicionadas a uma distância entre 2 a 6 km, a partir do ponto onde ocorreu a liberação do poluente, como mostra a Figura (4.1) (Domínio: 6 km de distância da fonte).

As liberações de  $SF_6$  começaram uma hora antes do início da amostragem. O tempo médio das medidas foi de 1 h e suas imprecisões são de 10 %. O local era principalmente residencial, com um comprimento de rugosidade de  $z_0 = 0,6$  m (é a altura em que o vento é zero).

A Tabela (1) mostra os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão na CLC de Copenhagen a serem utilizados no modelo. Na Tabela (1)  $\bar{u}$  é a velocidade do vento médio

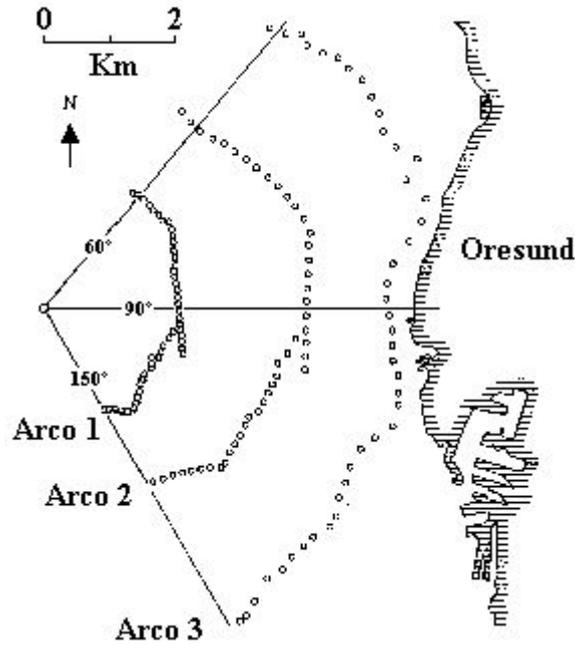


Figura 2: Experimento de Copenhagen.

( $m/s$ ),  $u_*$  representa a velocidade de fricção ( $m/s$ ),  $L$  é o comprimento de Monin-Obukhov ( $m$ ),  $w_*$  é a escala de velocidade convectiva vertical ( $m/s$ ),  $H_s$  é a altura da fonte ( $m$ ) e  $h$  é a altura ( $m$ ) da CLC. Estes dados meteorológicos são médias horárias.

Tabela 1: Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen (GRYNING et al., 1987).

Expt	$\bar{u}$ (115 m) ( $m.s^{-1}$ )	$\bar{u}$ (10 m) ( $m.s^{-1}$ )	$u_*$ ( $m.s^{-1}$ )	$L$ (m)	$w_*$ ( $m.s^{-1}$ )	$h$ (m)
1	3,4	2,1	0,36	-37	1,8	1980
2	10,6	4,9	0,73	-292	1,8	1920
3	5,0	2,4	0,38	-71	1,3	1120
4	4,6	2,5	0,38	-133	0,7	390
5	6,7	3,1	0,45	-444	0,7	820
6	13,2	7,2	1,05	-432	2,0	1300
7	7,6	4,1	0,64	-104	2,2	1850
8	9,4	4,2	0,69	-56	2,2	810
9	10,5	5,1	0,75	-289	1,9	2090

## 4.2 Coeficiente de Difusão e Perfil de Vento

Em problemas de difusão atmosférica, a escolha de uma parametrização turbulenta representa uma decisão fundamental para modelar a dispersão de poluentes. A partir de um ponto de vista físico, uma parametrização da turbulência é uma aproximação da natureza no sentido que os modelos matemáticos recebem uma relação aproximada que substitui um termo desconhecido. A confiabilidade de cada modelo depende fortemente da maneira como os parâmetros são calculados e relacionados ao entendimento da CLP (MANGIA et al., 2002).

Na literatura encontram-se diversas e variadas formulações para o coeficiente de difusão turbulento vertical (ULKE, 2000). O coeficiente de difusão dependente somente da turbulência utilizado neste trabalho é apresentado a seguir.

- **Fórmulas de Degrazia:** utilizadas em toda CLP.

– Condições instáveis ( $L \leq 0$ ) (MANGIA et al., 2002):

$$K_z = 0,22w_*h \left(\frac{z}{h}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{\frac{-4z}{h}} - 0,0003e^{\frac{8z}{h}}\right] \quad (54)$$

em que  $h$  é a altura da CLC.

Já quanto ao perfil de vento optou-se por fazer uso apenas do perfil de vento constante neste trabalho, visto que este já gera os resultados desejados levando as conclusões esperadas.

## 5 RESULTADOS

Com o propósito de testar o esquema de assimilação, a equação de advecção-difusão bidimensional independente de tempo, descrita por

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) \quad (55)$$

$$\bar{C} = Q\delta(z - h_f), \text{ para } x = 0 \quad (56)$$

$$K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0, \text{ para } z = 0 \text{ e } z = h \quad (57)$$

foi integrada como os seguintes parâmetros:  $\Delta x = 0,5\text{m}$ ,  $\Delta z = 20,5\text{m}$ , altura da camada limite  $h = 810\text{m}$  e altura da fonte  $h_f = 115\text{m}$ . No EKF a matriz que representa o sistema de observação é  $\mathbf{H} = \mathbf{I}$ , e as matrizes de covariância dos ruídos de observação e modelagem, são respectivamente  $\mathbf{R}_k = 2\mathbf{I}$  e  $\mathbf{Q}_n = 0,1\mathbf{I}$ , sendo que  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade da ordem de  $N_z = 41$ . O número de pontos na direção  $x$  é 15.000 (7.500 m). Estes parâmetros foram utilizados em duas avaliações da metodologia proposta: na primeira (Avaliação 1), foram assimilados os dados do experimento de Copenhagen para o caso 2D-Estacionário com a modelagem de (DEGRAZIA, 1998) (camada limite instável). Na segunda avaliação (Avaliação 2), assimilou-se dados sintéticos com diferentes distribuições de sensores no domínio  $(x, z)$ . Nas seções a seguir, apresentam-se estas avaliações.

### 5.1 Avaliação 1 - Assimilação dos Dados do Experimento de Copenhagen

Nesta avaliação o modelo é integrado a partir da condição inicial dada pela Equação (56). Como o caso 8 do Experimento de Copenhagen tem apenas três pontos em  $x$ , todos próximos a superfície (primeiro nível do modelo), assimila-se os três pontos onde há observação ( $x = 1900\text{m}$ ,  $x = 3600\text{m}$  e  $x = 5300\text{m}$ ).

Observa-se na Figura 3, que o EKF é eficiente em corrigir a trajetória do modelo nos pontos de inserção do dado, entretanto, há notória descontinuidade no ponto de assimilação. Isto ocorre porque o experimento fornece dados apenas ao nível do solo em três pontos distantes

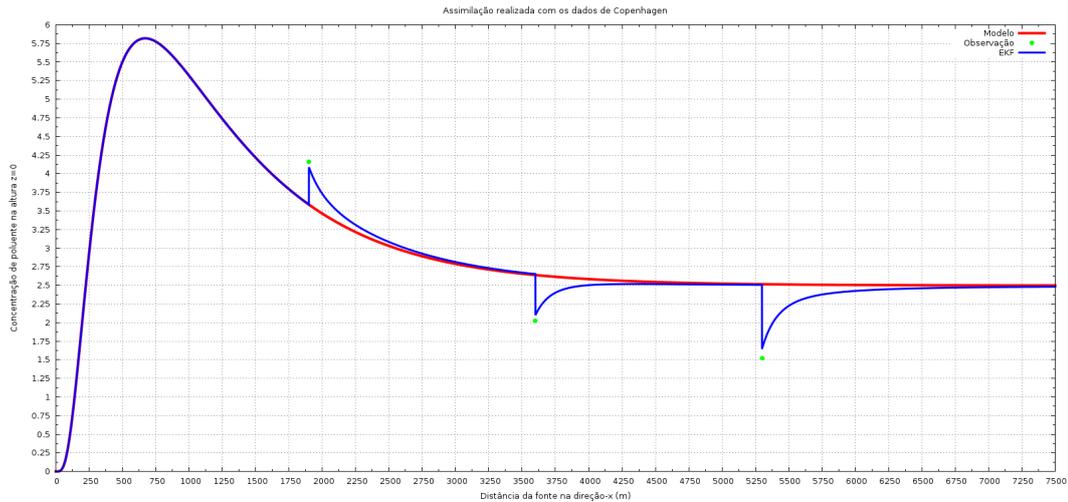


Figura 3: Modelo do filtro de Kalman linear conjunto (EKF).

da fonte (no caso analisado, 1900, 3600 e 5300 metros da fonte). Portanto, o resultado vai ao encontro dos resultados obtidas por Miller et. al. , onde os autores concluem que o filtro falha ao se assimilar poucos dados. Ou seja, para pequenas quantidades de dados disponíveis para a assimilação, deve-se aplicar o filtro com estatística de mais alta ordem e não apenas com o segundo e primeiro momento (média e variância). Entretanto, filtros com terceiro e quarto momento estatístico são computacionalmente inviáveis do ponto de vista operacional em problemas AD nos modelos de dispersão de poluentes.

Devido a impossibilidade de se explorar algumas características do EFK com os dados de Copenhagen testados, fez-se a avaliação 2, descrita na próxima seção.

## 5.2 Avaliação 2 - Assimilação de dados Sintéticos com Diferentes Distribuições no Domínio (x,z)

Com o objetivo de analisar a influência da frequência e distribuição das observações na performance do *extended Kalman filter* (EKF) foram realizados doze experimentos, divididos em três conjuntos, utilizando-se ainda dos parâmetros atmosféricos do experimento 8 de Copenhagen. Para realizar tal análise, observou-se os valores do erro calculado através da equação:

$$Erro = \frac{1}{N_x N_z} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{k=0}^{N_z} (C_{i,k}^o - C_{i,k}^a)^2 \quad (58)$$

onde os símbolos  $C^p$ ,  $C^o$  e  $C^a$ , referem-se respectivamente à concentração predita pelo modelo, observada e estimada pelo EFK. Ressalta-se que o problema estudado é estacionário, com integração na direção- $x$ .

### 5.2.1 Diferentes frequências de observação na direção- $x$

No primeiro conjunto de experimentos assimilou-se observações nos 41 pontos de grade na direção- $z$ , sendo que na direção- $x$  as observações foram inseridas nas seguintes frequências: a cada  $1 \Delta x$  (EXP1),  $750 \Delta x$  (EXP2),  $1500 \Delta x$  (EXP3),  $2250 \Delta x$  (EXP4),  $3750 \Delta x$  (EXP5) e  $5250 \Delta x$  (EXP6). Na Tabela 2 constam os erros relativos a cada experimento e nas Figuras 4 (a)-(c), apresenta-se respectivamente os EXP2, EXP4 e EXP6 para  $z = 0m$ .

Tabela 2: Erro Relativo aos Experimentos 1, 2, 3, 4, 5 e 6.

EXP	Freq. de OBS	Erro
1	cada $1 \Delta x$	$4,2695 \cdot 10^{-4}$
2	cada $750 \Delta x$	$1,0991 \cdot 10^{-1}$
3	cada $1500 \Delta x$	$1,1941 \cdot 10^{-1}$
4	cada $2250 \Delta x$	$1,7564 \cdot 10^{-1}$
5	cada $3750 \Delta x$	$1,9323 \cdot 10^{-1}$
6	cada $5250 \Delta x$	$4,7478 \cdot 10^{-1}$

Ao comparar-se os erros, fica claro que a estimativa realizada pelo EFK é melhorada a medida que o dado é assimilado com maior frequência. Contudo, o custo computacional é também cresce a medida que se aumenta o número de pontos onde há observação.

### 5.2.2 Diferentes números de sensores na direção- $z$

O processo de assimilação também foi avaliado em relação ao número de pontos de medidas na coordenada vertical. Neste conjunto, composto por três experimentos, as observações foram inseridas a cada  $750\Delta x$  variando apenas o quantidade de sensores ( $N_s$ ) bem distribuídas ao longo do eixo  $z$ . No EXP7 foi usado  $N_s = 9$  para as seguintes posições:  $\Delta z = 0, 5, 10, 15, 20, 30, 35, 40$ ; para o EXP8 foi usado  $N_s = 7$  para as seguintes posições:  $\Delta z = 0, 10, 15, 20, 25, 30, 40$ ; e no EXP9 foi usado  $N_s = 5$  para as seguintes posições:  $\Delta z = 0, 10, 20, 30, 40$ . Os resultados são apresentados na Tabela 3 e Figura 5.

Tabela 3: Erro para diferentes números de sensores na direção- $z$ .

EXP	Número de sensores na direção- $z$	Erro
7	$N_s = 9$	$1,0935 \cdot 10^{-1}$
8	$N_s = 7$	$1,1006 \cdot 10^{-1}$
9	$N_s = 5$	$1,1083 \cdot 10^{-1}$

Observando a Tabela 3 e a Figura 5, nota-se que de maneira semelhante ao que ocorre na primeira classe de experimentos, uma diminuição na quantidade de níveis de observações bem distribuídas em  $z$  também causa um aumento no erro.



Figura 4: Efeito da freqüência de observação no EKF: (a) EXP2, (b) EXP4



Figura 5: Efeito dos diferentes números de sensores na direção- $z$  no EKF: (a) EXP7, (b) EXP8, (c) EXP9

### 5.2.3 Diferentes arranjos de 5 sensores ao longo da direção- $z$

Por fim, em mais um conjunto composto por três experimentos analisa-se a performance do filtro para dados amostrados a cada  $750\Delta x$ , com cinco pontos de observação em  $z$  ( $N_s = 5$ ). Três diferentes arranjos são considerados: Grade-1, sensores uniformemente distribuídos (EXP10), Grade-2 com sensores posicionados próximos ao chão ( $\Delta z = 0, 2, 4, 6, 8$ ) (EXP11) e Grade-3 com sensores posicionados próximos ao topo da camada limite ( $\Delta z = 32, 34, 36, 38, 40$ ) (EXP12). Na Tabela 4 apresenta-se os erros destes diferentes arranjos e na Imagem 6 os gráficos deste experimento.

Tabela 4: Erro para três arranjos de observações na direção- $z$ .

EXP	Tipo de Grade	Erro
10	Grade-1	$1,1083 \cdot 10^{-1}$
11	Grade-2	$1,2815 \cdot 10^{-1}$
12	Grade-3	$1,2547 \cdot 10^{-1}$

Neste experimento, percebe-se que, ao se utilizar um número de sensores que não abrange toda as alturas da grade de assimilação, o melhor arranjo para a distribuição de sensores na direção- $z$  é aquela em que os sensores são bem distribuídos ao longo da direção- $z$ .



Figura 6: Assimilação com observações distribuídas em diferentes arranjos: (a) EXP10, (b) EXP11, (c) EXP12.

## 6 CONCLUSÕES

A partir do experimento realizado com dados reais, conclui-se que o EKF é efetivo na solução de problemas de assimilação de dados em aplicada a concentração de poluentes. Entretanto, o sistema é sensível a qualidade e quantidades de dados disponíveis para inserção. Em regiões remotas com poucos dados, tais como oceanos e florestas tropicais, o processo de assimilação pode falhar, pois nestas regiões os graus de liberdade do modelo são, geralmente, muito maiores do que o número de observações disponíveis para assimilação. Nestes casos, a assimilação de dados de dados de satélite ganha importância.

Quanto aos experimentos realizados com dados sintéticos, estes reforçam que quanto maior a amostra de observações a serem assimiladas, tanto na direção- $x$  como na direção- $z$ , melhor é a correção feita pelo filtro. E também, assimilações realizadas com observações uniformemente distribuídas na direção- $z$ , apresentam melhores resultados do que outros arranjos de observações na direção- $z$ , assimiladas com a mesma frequência na direção- $x$ .

Destaca-se ainda, que o EKF não necessita do modelo adjunto e tangente linear, ou seja, o código é independente do modelo ao contrário do método variacional quadridimensional (4DVAR), que segundo a literatura tem precisão equivalente as melhores implementações do *Kalman filter*. Entretanto, a grande contribuição deste trabalho, a partir dos resultados obtidos, é demonstrar a gestores e formadores de opinião que uma maior rede de captação de dados sobre concentração de poluentes levaria a uma melhora expressiva nos modelos de previsão da dispersão de poluentes acompanhados de assimilação de dados.

## REFERÊNCIAS

- ANDERSON, B.; MOORE, J. **Optimal filtering**. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1979. 357p.
- ANDERSON, J. An ensemble adjustment Kalman filter for data assimilation. **Monthly Weather Review**, [S.l.], v.129, p.2884–2903, 2001.
- ANFOSSI, D. **Dispersão lagrangeana na camada limite planetária**. Editora da UFRGS, Porto Alegre: Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária, Organizadores: D.M. Moreira, J.C. Carvalho e M.T. Vilhena, 2005.
- BARAD, M. L. Project Prairie-Grass: A field program in diffusion. **Geophys. Res. , Air Force Cambridge research Centre , USA**, [S.l.], v.I and II, n.59, 1958.
- BARBU, A.; SEGERS, A.; SCHAAP, M.; HEEMINK, A.; BUILTJES, P. A multi-component data assimilation experiment directed to sulphur dioxide and sulphate over Europe. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.43, p.1622–1631, 2011.
- BERLYAND, M. **Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere**. Raleigh, NC, USA: Translated version by NERC, USEPA, 1975.
- BISHOP, C.; ETHERTON, B.; MAJUMDAR, S. Adaptive sampling with ensemble transform Kalman filter. Part I: Theoretical Aspects. **Monthly Weather Review**, [S.l.], v.129, p.420–436, 2001.
- BOWNE, N.; LONDERGAN, R. **Overview, result and conclusions for the EPRI plume model validation and development project: plane site**. [S.l.: s.n.], 1981. EPRI Report. (EA-3074).
- BROWN, M. J.; ARYA, S. P.; SNYDER, W. Plume descriptors from a non-Gaussian concentration model. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.31, p.183–189, 1997.
- BURGERS, F.; LEEUWEN, P. van; EVENSEN, G. Analysis scheme in the ensemble Kalman filter. **Monthly Weather Review**, [S.l.], v.126, p.1719–1724, 1998.
- CATALANO, G. D. An analytical solution to the turbulent diffusion equation with mean vertical wind. **Southeastern Sem. Thermal**, [S.l.], p.143–151, 1982.

- CONSTANTINESCU, E.; SANDU, A.; CHAI, T.; CARMICHAEL, G. Assessment of ensemble-based chemical data assimilation in idealized setting. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.41, p.18–36, 2007.
- DALEY, R. **Atmospheric data analysis**. Cambridge: University Press, 1991. 457p.
- DEGRAZIA, G. A. Modelling dispersion from elevated sources in a planetary boundary layer dominated by moderate convection. **Il Nuovo Cimento**, [S.I.], v.21C, p.345–353, 1998.
- DEMUTH, C. A. Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.12, p.1255–1258, 1978.
- DORAN, J. C.; HORST, T. W. An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.19, p.939–951, 1985.
- EMILI, E.; POPP, C.; WUNDERLE, S.; PETITTA, M. Mapping particulate matter in alpine regions with satellite and ground-based measurements: An exploratory study for data assimilation. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.45, p.4344–4353, 2011.
- EVENSEN, G. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods error statistics. **Journal of Geophysical Research**, [S.I.], v.99, n.C5, p.10143–10162, 1994.
- FISHER, B. A. The long range transport of sulphur dioxide. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.9, p.1063–1070, 1975.
- GAO, J.; XUE, M.; STENSRUD, D. The development of a hybrid EnKF-3DVAR algorithm for storm-scale data assimilation. **Advances in Meteorology**, [S.I.], p.1–12, 2013.
- GOLUB, G.; LOAN, V. **Matrix computations**. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 1983. 476p.
- GRYNING, S. E. **Elevated source SF<sub>6</sub> - tracer dispersion experiments in the Copenhagen area**. Roskilde, Denmark: Risoe National Laboratory, 1981. Report. (RISOE-R-446).
- GRYNING, S. E.; LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations. **Journal of Climate and Applied Meteorology**, [S.I.], v.23, n.4, p.651–660, 1984.
- GRYNING, S.; HOLTSLAG, A.; IRWING, J.; SILVERSTEN, B. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.21, n.1, p.79–89, 1987.
- HÄRTER, F.; CAMPOS VELHO, H. Recurrent and feedforward neural networks trained with cross correlation applied to the data assimilation in chaotic dynamic. **Revista Brasileira de Meteorologia**, [S.I.], 2005. No prelo.

HÄRTER, F.; CAMPOS VELHO, H. Applying neural network in nonlinear model: an encouraging approach. In: WMO INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ASSIMILATION OF OBSERVATIONS IN METEOROLOGY AND OCEANOGRAPHY, 4., 2005, Pragma. **Anais...** WMO, 2005. v.1, p.219.

HÄRTER, F.; CAMPOS VELHO, H. New approach to applying neural network in nonlinear dynamic model. **Applied Mathematical Modelling**, [S.l.], v.32, n.12, p.2621–2633, 2008.

HÄRTER, F.; CAMPOS VELHO, H.; REMPEL, E.; CHIAN, A. Application of Artificial Neural Networks in Auroral Data Assimilation. **Journal of Geophysical Research - Space Physics**, [S.l.], 2004. No prelo.

HAYDEN, K.; OLSON, E.; TITI, E. Discrete data assimilation in the Lorenz and 2D Navier-Stokes equations. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, [S.l.], v.240, p.1416–1425, 2011.

HUANG, X.-Y.; YANG, X. **Variational data assimilation with Lorenz model**. Sweden: SMHI Norrköping, 1996. (26).

IRWIN, J. S. A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.13, p.191–194, 1979.

KALNAY, E. **Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2003. 369p.

KEPPENE, C. Data assimilation into a primitive-equation model with a parallel ensemble Kalman filter. **Monthly Weather Review**, [S.l.], v.128, n.6, p.1971–1981, 2000.

LAW, K.; SHUKLA, A.; STUART, A. Analysis of the 3DVAR filter for the partially observed Lorenz '63 model. **Discrete and Continuous Dynamical Systems A**, [S.l.], v.34, p.1061–1078, 2014.

LIN, J. S.; HILDEMAN, L. M. A. A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.31, p.59–71, 1997.

MANGIA, C.; MOREIRA, D. M.; SCHIPA, I.; DEGRAZIA, G. A.; TIRABASSI, T.; RIZZA, U. Evaluation of a new eddy diffusivity parametrisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.36, p.67–76, 2002.

MENDEL, J. **Lessons in estimation theory for signal processing, communications, and control**. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1995. 561p.

MILLER, R.; GUIL, M.; GAUTIEZ, F. Advanced Data Assimilation in Strongly Nonlinear System. **Journal of the Atmospheric Sciences**, [S.l.], v.51, n.8, p.1037–1056, 1995.

MIYOSHI, T. **Ensemble Kalman filter experiments with a primitive equation global model**. College Park, Maryland, USA: [s.n.], 2005. 197p.

MOGENSEN, K.; HUANG, X.-Y. **Variational parameter estimation with the Lorenz model**. [S.I.]: Danish Meteorological Institute, 1998. (DK2100).

NIEUWSTADT, F. T. M. An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.14, p.1361–1364, 1980.

NIEUWSTADT, F. T. M.; HAAN, B. J. An analytical solution of the one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.15, p.845–851, 1981.

NOWOSAD, A. **Novas abordagens em assimilação de dados meteorológicos**. São José dos Campos: [s.n.], 2001. 120p. INPE-8481-TDI/779.

OTT, E.; HUNT, B.; SZUNYOGH, I.; ZIMIN, A.; KOSTELICH, A.; CORAZZA, M.; KALNAY, E.; PATIL, D.; YORKE, E. Exploiting local low dimensionality of the atmospheric dynamics for efficient Kalman filtering, <http://arxiv.org/abs/physics/0203058>. , [S.I.], 2002.

PASQUILL, F.; SMITH, F. B. **Atmospheric Diffusion**. 3.ed. New York: Halsted Press, 1983.

ROBERTS, O. F. T. The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. **Proceedings of the Royal Society of London**, [S.I.], v.104, p.640–648, 1923.

ROUNDS, W. Solutions of the two-dimensional diffusion equation. **American Geophysical Union**, [S.I.], v.36, p.395–405, 1955.

SCRIVEN, R. A.; FISHER, B. A. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout - II - The efect of turbulent diffusion. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.9, p.59–69, 1975.

SHARAN, M.; SINGH, M. P.; YADAV, A. K. A mathematical model for the dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.30, p.1137–1145, 1996.

SHARAN, M.; SINGH, M. P.; YADAV, A. K.; AGARWAL, P.; NIGAM, S. A mathematical model for dispersion of air pollutants in low winds conditions. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.30, p.1209–1220, 1996.

SIVERSTEN, B.; BÖHLER, T. **Verification of dispersion estimates using tracer data**. Lilleström, Norway: The Norwegian Institute for Air Research, 1985. NILU Report. (TR 19/85).

SMITH, F. B. The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere. **Journal of Fluid Mechanics**, [S.I.], v.2, p.49–76, 1957.

SMITH, F. B. **Convection-diffusion processes below a stable layer**. London: Meteorological Research Committee, 1957. (1048).

SORENSEN, H. Least-square estimation: from Gauss to Kalman. **IEEE Spectrum**, [S.I.], v.7, n.7, p.63–68, 1970.

STRANG, G. **Introduction to applied mathematics**. Cambridge: Wellesley-Cambridge Press, 1986. 758p.

STULL, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Dordrecht, Holanda: Kluwer Academic Publishers, 1988.

TIPPET, M.; ANDERSON, J.; BISHOP, C.; HAMILL, T.; WITAKER, J. Ensemble square root filters. **Monthly Weather Review**, [S.I.], v.131, p.1485–1490, 2003.

TIRABASSI, T. **Dispersão euleriana na camada limite planetária**. Editora da UFRGS, Porto Alegre: Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária, Organizadores: D.M. Moreira, J.C. Carvalho e M.T. Vilhena, 2005.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. An analytical model for a screen evaluation of the environmental impact from a single point source. **Il Nuovo Cimento**, [S.I.], v.15c, p.181–190, 1992.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. An air pollution model for complex terrain. **Proceeding of Air Pollution conference, Monterrey, México**, [S.I.], p.149–156, 1993.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. A practical model for the dispersion of skewed puffs. **Journal of Applied Meteorology**, [S.I.], v.34, p.989–993, 1995.

TIRABASSI, T.; TAGLIAZUCCA, M.; PAGGI, P. A climatological model of dispersion in an inhomogeneous boundary layer. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.23, p.857–862, 1989.

TIRABASSI, T.; TAGLIAZUCCA, M.; ZANNETTI, P. A non-Gaussian plume dispersion model: description and evaluation against tracer measurements. **JAPCA**, [S.I.], v.36, p.592–596, 1986.

ULKE, A. G. New turbulent parameterisation for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.34, p.1029–1042, 2000.

VAN ULDEN, A. P. Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground. **Atmospheric Environment**, [S.I.], v.12, p.2125–2129, 1978.

WHITAKER, J.; HAMIL, T. Ensemble data assimilation without perturbed observation. **Monthly Weather Review**, [S.I.], v.130, p.1913–1924, 2002.

YEH, G.; HUANG, C. Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere. **Boundary-Layer Meteorology**, [S.l.], v.9, p.381–390, 1975.

ZHANG, X.; HEEMINK, A.; EIJKEREN, J. Data assimilation in transport models. **Applied Mathematical Model**, [S.l.], v.21, n.1, p.1–14, 1997.