

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE MESQUITA FILHO”

INSTITUTO DE QUÍMICA – CAMPUS ARARAQUARA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA, FÍSICA E MATEMÁTICA

**APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA AVALIAR A QUALIDADE
DO AR COM BASE EM DADOS METEOROLÓGICOS, GEOGRÁFICOS E DE
POLUENTES ATMOSFÉRICOS**

ISABELLE DE CÁSSIA CASTILHO VILLALBA

ARARAQUARA - SP

2025

ISABELLE DE CASSIA CASTILHO VILLALBA

**APLICAÇÃO DE REDES NEURAS ARTIFICIAIS PARA AVALIAR A QUALIDADE
DO AR COM BASE EM DADOS METEOROLÓGICOS, GEOGRÁFICOS E DE
POLUENTES ATMOSFÉRICOS**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Instituto de Química, da
Universidade Estadual Paulista “Júlio de
Mesquita Filho” como parte das
exigências para a obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Química.

Orientadora: Profa. Dra. Érica Regina
Filletti Nascimento

ARARAQUARA - SP

2025

V714a

Villalba, Isabelle de Cássia Castilho

Aplicação de redes neurais artificiais para avaliar a qualidade do ar com base em dados meteorológicos, geográficos e de poluentes atmosféricos. / Isabelle de Cássia Castilho Villalba. -- Araraquara, 2025
43 p. : il., tabs.

Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Engenharia Química) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara
Orientadora: Érica Regina Filletti Nascimento

1. Redes neurais (Computação). 2. Controle da qualidade do ar. 3. Classificação. I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Dados fornecidos pelo autor(a).

ISABELLE DE CASSIA CASTILHO VILLALBA

**APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA AVALIAR A QUALIDADE
DO AR COM BASE EM DADOS METEOROLÓGICOS, GEOGRÁFICOS E DE
POLUENTES ATMOSFÉRICOS**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Instituto de Química, da
Universidade Estadual Paulista “Júlio de
Mesquita Filho” como parte das
exigências para a obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Química.

Data de defesa: 08/12/2025

Banca Examinadora:

Prof.^a Dra. Érica Regina Filletti Nascimento

Prof. Dr. Adriano dos Santos

Prof. Dr. Everton Carvalho dos Santos

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Prof. Dra. Érica Filletti, pela orientação, ensinamentos, disponibilidade e pelas contribuições fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho, sempre guiando com atenção e profissionalismo cada etapa desta pesquisa.

Aos membros da banca avaliadora, Prof. Dr. Everton Carvalho e Prof. Dr. Adriano dos Santos, pelas trocas de conhecimento e contribuições para este trabalho.

Agradeço de todo o coração aos meus pais, Marcos e Cássia, pelo amor incondicional, pelo apoio em todos os momentos e por acreditarem na minha capacidade. À minha avó, Izaura, por todo afeto, incentivo e pelas palavras de motivação que sempre me acompanharam, sendo uma referência de força e de carinho em minha vida. E ao meu namorado, Wellington, por todo o apoio, carinho, paciência, compreensão e conselhos, que fizeram toda a diferença para que eu chegasse até aqui.

Por fim, estendo meu agradecimento à Universidade Estadual Paulista (UNESP), pela formação de excelência e pelo ambiente acadêmico que possibilitou meu crescimento pessoal e profissional ao longo dessa trajetória.

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo classificar a qualidade do ar a partir de dados meteorológicos, geográficos e de concentração de poluentes atmosféricos, utilizando Redes Neurais Artificiais (RNAs) como método de análise. A motivação central da pesquisa está no uso da Inteligência Artificial para tornar o monitoramento ambiental mais eficiente e apoiar decisões em políticas públicas de saúde e sustentabilidade. Para isso, empregou-se a base de dados *Air Quality and Pollution Assessment*, formada por 4.775 amostras classificadas inicialmente em quatro categorias de qualidade do ar (boa, moderada, ruim e perigosa), posteriormente agrupadas em duas classes (próprio e impróprio para respiração) com o propósito de melhorar o desempenho do modelo. A RNA foi desenvolvida e treinada no software MATLAB, adotando a arquitetura Multilayer Perceptron (MLP) e o algoritmo Gradiente Conjugado Escalonado (SCG), variando-se o número de neurônios da camada oculta para identificar a configuração com melhor desempenho. O modelo de três neurônios apresentou os resultados mais satisfatórios, com acurácia de 0,9730, F1 Score de 0,9815 e área sob a curva ROC (AUC) de 0,9614, evidenciando alta precisão e capacidade de generalização na classificação da qualidade do ar. Com este estudo conclui-se que as RNAs se mostram ferramentas promissoras para a análise da qualidade do ar, pois aumentam a precisão e a agilidade na interpretação de grandes conjuntos de dados ambientais, contribuindo para ações preventivas, planejamento urbano e políticas de proteção à saúde pública.

Palavras-chave: Redes Neurais Artificiais. Qualidade do ar. Classificação. Poluentes atmosféricos. MLP. MATLAB.

ABSTRACT

This study aims to classify air quality using meteorological, geographical, and atmospheric pollutant concentration data, employing Artificial Neural Networks (ANNs) as the analytical method. The central motivation of the research lies in the use of Artificial Intelligence to make environmental monitoring more efficient and to support decision-making in public health and sustainability policies. For this purpose, the *Air Quality and Pollution Assessment* dataset was used, consisting of 4,775 samples initially classified into four air-quality categories (good, moderate, poor, and hazardous), which were later grouped into two classes (suitable and unsuitable for breathing) to improve model performance. The ANN was developed and trained in MATLAB, adopting a Multilayer Perceptron (MLP) architecture and the Scaled Conjugate Gradient (SCG) algorithm, varying the number of neurons in the hidden layer to identify the configuration with the best performance. The model with three neurons achieved the most satisfactory results, with an accuracy of 0.9730, an F1-Score of 0.9815, and an area under the ROC curve (AUC) of 0.9614, indicating high precision and strong generalization capability in air-quality classification. This study concludes that ANNs are promising tools for air-quality analysis, as they increase the accuracy and agility in interpreting large environmental datasets, contributing to preventive actions, urban planning, and public health protection policies.

Keywords: Artificial Neural Networks. Air quality. Classification. Atmospheric pollutants. MLP. MATLAB.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Representação de um neurônio artificial.....	18
Figura 2: Representação da estrutura de uma Rede Neural Artificial MLP.....	20
Figura 3: Matrizes de confusão dos conjuntos de treinamento, validação, teste e conjunto total, com 3 neurônios na camada oculta.....	35
Figura 4: Histograma de erros da RNA com 3 neurônios na camada oculta.....	36
Figura 5: Desempenho da RNA com 3 neurônios na camada oculta.....	37
Figura 6: Curvas ROC da RNA com 3 neurônios na camada oculta para os conjuntos de treinamento, validação, teste e conjunto total.....	38

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Quantidade de amostras por categoria.....	23
Tabela 2: Parâmetros meteorológicos utilizados.....	24
Tabela 3: Parâmetros de poluentes atmosféricos utilizados.....	24
Tabela 4: Parâmetros geográficos utilizados.....	24
Tabela 5: Representação binária baseada na classificação da qualidade do ar.....	25
Tabela 6: Métricas de classificação do conjunto total.....	32
Tabela 7: Métricas de classificação do conjunto de treinamento.....	32
Tabela 8: Métricas de classificação do conjunto de validação.....	33
Tabela 9: Métricas de classificação do conjunto de teste.....	33

SUMÁRIO

1. Introdução	11
2. Referencial Teórico	15
2.1 Inteligência Artificial	15
2.2 Redes Neurais Artificiais	17
2.3 Arquitetura de Redes <i>Feedforward</i> Multicamadas (MLP)	19
2.4 <i>Backpropagation</i> e o Algoritmo de Gradiente Conjugado Escalonado (SCG) ..	21
3. Metodologia.....	23
3.1 Tratamento da base de dados	23
3.2 A RNA.....	25
3.3 Métricas de classificação	28
3.3.1 Acurácia	28
3.3.2 Precisão	29
3.3.3 Sensibilidade	29
3.3.4 Especificidade	30
3.3.5 F1 Score.....	30
3.3.6 AUC.....	31
4. Resultados e Discussão	32
5. Considerações finais	39
6. Referências Bibliográficas	40

1. Introdução

A poluição atmosférica é considerada um dos maiores desafios ambientais da atualidade, impactando diretamente a saúde e a qualidade de vida da população. Sua complexidade decorre da relação entre diversos fatores tecnológicos, socioeconômicos e naturais, o que gera a necessidade de um enfrentamento multidimensional. Por isso, a degradação da qualidade do ar consiste em um desafio global e está intimamente associada a processos urbanos, industriais e energéticos, sendo amplamente reconhecida como uma ameaça à sustentabilidade, ao desenvolvimento e ao bem-estar humano.

De acordo com o Ministério da Saúde (2021), a exposição à poluição do ar está relacionada ao aumento de atendimentos médicos e hospitalizações por problemas cardiorrespiratórios, à mortalidade, más formações congênitas e prejuízos aos sistemas reprodutivo, endócrino e metabólico. O relatório *State of Global Air 2024* classificou a poluição do ar como o segundo principal fator de risco global de mortalidade, superando inclusive hábitos como o tabagismo e a dieta inadequada (HEI, 2024). Além disso, a Organização Mundial da Saúde (2024) estimou que 6,7 milhões de mortes prematuras ocorreram devido à presença de material particulado na atmosfera e que 92% da população mundial vive em locais onde os níveis de qualidade do ar ultrapassam o limite de segurança, o que reforça a necessidade de monitoramento e previsão eficientes das variações de poluentes na atmosfera.

A situação é ainda mais crítica na Ásia Meridional e no Sudeste Asiático, regiões que concentram algumas das piores médias anuais de poluição do planeta. Países como Índia, Bangladesh, Paquistão e Nepal apresentam concentrações médias de material particulado fino ($MP_{2.5}$) superiores a dez vezes os limites de segurança estabelecidos pela OMS (HEI, 2024), aumentando os riscos e ocorrências de doenças como asma, bronquite crônica, doença isquêmica do coração e até mesmo câncer de pulmão (HEI, 2024 ; NATIONAL GEOGRAPHIC BRASIL, 2022). Em países em desenvolvimento, como o Brasil, os efeitos da urbanização acelerada, do crescimento da frota veicular e da expansão industrial também intensificam as emissões atmosféricas e pressionam os sistemas de monitoramento e controle ambiental.

Desde 2001, o Ministério da Saúde conta com o componente Vigilância em Saúde Ambiental e Qualidade do Ar (Vigiar), responsável pelo desenvolvimento de ações voltadas ao monitoramento e à análise da qualidade do ar, cooperando com estados e municípios para proteger e recuperar o meio ambiente. O programa tem como foco principal os centros urbanos de alta densidade populacional, onde as condições meteorológicas, o tráfego intenso e as emissões industriais se combinam, gerando níveis críticos de poluição. Entre as medidas estratégicas e relevantes para o Vigiar, encontra-se “o incentivo ao investimento em tecnologias de controle e monitoramento da qualidade do ar, especialmente em grandes centros urbanos e com elevado adensamento populacional” (MINISTÉRIO DA SAÚDE, 2021).

Atualmente, a qualidade do ar é monitorada por meio de estações fixas, instaladas em locais estratégicos para coletar dados continuamente; sensores portáteis, que permitem medições em locais de difícil acesso; e sistemas de monitoramento remoto, compostos por sensores acoplados a veículos ou drones, que ampliam o alcance das medições (EXCELENCIA AMBIENTAL, [s.d.]). Independentemente da metodologia empregada, é fundamental que os dados coletados sejam analisados por especialistas e utilizados tanto para informar a população quanto para orientar políticas públicas e estratégias de mitigação.

Contudo, o Brasil ainda enfrenta grandes desafios estruturais no monitoramento da qualidade do ar. O relatório *O Estado da Qualidade do Ar no Brasil* (WRI BRASIL, 2021) evidencia lacunas significativas, alertando para a necessidade de ampliação da rede nacional de estações. Complementando essa perspectiva, o estudo *Dimensionamento da Rede Básica de Monitoramento da Qualidade do Ar no Brasil* (IEMA, 2024) evidencia a insuficiência da infraestrutura nacional de monitoramento. Segundo o relatório, seriam necessárias, no mínimo, 46 novas estações automáticas para que o país alcance níveis de cobertura semelhantes aos observados em padrões internacionais, como os dos Estados Unidos, e 138 novas estações para atingir patamares comparáveis aos adotados na Europa. Atualmente, cerca de 80% das estações existentes concentram-se na Região Sudeste, especialmente em São Paulo, Rio de Janeiro e Minas Gerais (VORMITTAG et al., 2021), o que reduz a representatividade nacional e compromete a abrangência dos diagnósticos sobre a exposição da população aos poluentes atmosféricos.

Além das limitações técnicas e financeiras, há entraves relacionados à transparência e à atualização dos dados. Muitos estados não disponibilizam informações em tempo real, e parte dos equipamentos opera com tecnologia defasada, o que prejudica a confiabilidade das medições (SICFLUX, 2025). Essa realidade reforça a importância de investir em soluções complementares e em modelos analíticos que ampliem a capacidade de diagnóstico e previsão da qualidade do ar, reduzindo custos e aumentando a eficiência do processo de monitoramento.

A qualidade do ar é definida pelo grau de pureza da atmosfera em relação aos padrões estabelecidos por norma. A Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB, 2023) define “poluente atmosférico” como qualquer substância presente no ar que, pela sua concentração, possa torná-lo impróprio, nocivo ou ofensivo à saúde humana, à fauna e à flora. Os principais poluentes monitorados incluem o material particulado (MP_{10} e $MP_{2.5}$), o ozônio (O_3), o dióxido de nitrogênio (NO_2), o dióxido de enxofre (SO_2) e o monóxido de carbono (CO). Esses compostos são amplamente utilizados como indicadores da qualidade do ar por refletirem tanto as emissões diretas de atividades humanas quanto os processos químicos secundários que ocorrem na atmosfera.

A distribuição e a concentração desses poluentes são influenciadas por condições meteorológicas e geográficas. Ventos fracos, inversões térmicas e baixa umidade favorecem o acúmulo de contaminantes, enquanto ventos moderados e boa mistura vertical contribuem para a dispersão (CETESB, 2023). No inverno, a estabilidade atmosférica e as temperaturas mais baixas dificultam a dispersão dos poluentes, ocasionando episódios críticos, especialmente nas grandes metrópoles.

Diante dos desafios enfrentados no monitoramento e da necessidade de aprimorar a previsão da qualidade do ar, surge o potencial das Redes Neurais Artificiais (RNAs) como ferramenta de apoio à gestão ambiental. As RNAs constituem técnicas de aprendizado de máquina capazes de identificar padrões complexos em grandes volumes de dados meteorológicos, geográficos e de poluentes atmosféricos, possibilitando análises preditivas com maior precisão e menor custo operacional.

Assim, este estudo tem como objetivo analisar os principais desafios relacionados à classificação e à predição da qualidade do ar, bem como discutir o

potencial das RNAs como solução tecnológica. Para isso, será desenvolvido e treinado um modelo de RNA utilizando dados meteorológicos, geográficos e de concentração de poluentes atmosféricos provenientes de uma base com 4.775 amostras, intitulada *Air Quality and Pollution Assessment* (MATEEN, 2024), atualizada em dezembro de 2024 e disponibilizada no repositório *Kaggle*. O modelo será avaliado quanto à precisão e eficiência, a fim de verificar sua aplicabilidade prática como ferramenta de apoio à tomada de decisão em políticas ambientais e de saúde pública.

Embora o presente estudo tenha o foco voltado à realidade brasileira, optou-se pela utilização de uma base de dados asiática devido à sua amplitude temporal e qualidade das medições, considerando que as bases públicas nacionais ainda apresentam lacunas significativas em cobertura e consistência. Essa escolha visa garantir robustez estatística e consistência dos resultados, permitindo que, posteriormente, a metodologia possa ser adaptada a contextos nacionais.

Espera-se que os resultados obtidos contribuam não apenas para o avanço da pesquisa em desenvolvimento e uso de Redes Neurais Artificiais para modelagem preditiva ambiental, mas também para a formulação de políticas públicas mais eficazes e sustentáveis voltadas à proteção da saúde e da qualidade do ar.

2. Referencial Teórico

Nesta seção será apresentada a base teórica utilizada para o desenvolvimento deste trabalho, com o objetivo de contextualizar e facilitar a compreensão do uso da RNA e dos resultados obtidos. Para isso, inicialmente será introduzido o conceito e um breve histórico da Inteligência Artificial, destacando sua evolução ao longo do tempo. Na sequência, será abordada a definição de rede neural artificial, bem como a arquitetura utilizada e o processo de aprendizado envolvidos no modelo aplicado.

2.1 Inteligência Artificial

A Inteligência Artificial é, sem dúvidas, uma das áreas mais estudadas atualmente. Desde o seu surgimento, ela desperta a curiosidade por tentar entender e reproduzir a capacidade humana de pensar, aprender e tomar decisões. De acordo com Marvin Minsky (1968), a Inteligência Artificial pode ser definida como “a ciência de criar máquinas que fazem coisas que requerem inteligência se feitas por seres humanos”. Essa definição resume de forma simples e direta o propósito central da área: criar sistemas capazes de resolver problemas complexos, compreender o ambiente em que estão inseridos e agir de maneira racional.

O ponto de partida formal da Inteligência Artificial como ciência aconteceu em 1956, durante a Conferência de Dartmouth, nos Estados Unidos. Foi ali que pesquisadores como John McCarthy, Marvin Minsky, Claude Shannon e Herbert Simon definiram o termo “*Artificial Intelligence*” e traçaram as primeiras metas de pesquisa. (RUSSELL; NORVIG, 2010). No entanto, a filosofia por trás desses estudos é muito mais antiga, afinal, Aristóteles (384-322 a.c) já buscava compreender o funcionamento do pensamento humano sob a perspectiva de lógica e racionalidade, abrindo portas para que pudéssemos compreender o cérebro humano e os mecanismos de aprendizagem. (SMITH, 2001)

Séculos depois, Thomas Hobbes (1588–1679) sugeriu que o raciocínio humano poderia ser comparado a um processo matemático, em que as ideias seriam combinadas de forma lógica, semelhante a um cálculo numérico, o que despertou a ideia de que processos mentais poderiam ser explicados por meio de regras formais e operações sistemáticas. Algumas décadas depois, Gottfried Wilhelm Leibniz (1646–1716) aprofundou essa concepção ao propor que o raciocínio poderia ser reduzido a

manipulações simbólicas em uma linguagem lógica universal, o que ele chamou de *calculus ratiocinator*. Além disso, Leibniz desenvolveu dispositivos mecânicos capazes de realizar operações matemáticas, demonstrando que o pensamento lógico poderia, em parte, ser automatizado. Essas ideias anteciparam o princípio fundamental da Inteligência Artificial: a possibilidade de representar e reproduzir o raciocínio humano por meio de processos computacionais (RUSSELL; NORVIG, 2010).

Então, George Boole (1815–1864) consolidou essas bases ao criar a álgebra booleana, estruturada sobre o sistema binário de 0 e 1. Essa formalização permitiu transformar a lógica em operações matemáticas precisas e se tornou o fundamento da lógica digital e dos computadores modernos, estabelecendo a base sobre a qual a Inteligência Artificial seria construída (RUSSELL; NORVIG, 2010).

Com o avanço dos estudos sobre lógica, matemática e raciocínio, Alan Turing (1912–1954) se destacou ao propor um modelo matemático capaz de representar qualquer processo de cálculo, conhecido como a máquina de Turing. Sua formulação deu origem ao Princípio de Church–Turing, segundo o qual qualquer função computável pode ser executada por esse modelo, estabelecendo as bases da ciência da computação e, consequentemente, da Inteligência Artificial (RUSSELL; NORVIG, 2010).

Mais tarde, os estudos sobre a Inteligência Artificial passaram a incorporar métodos estatísticos para lidar com situações de incerteza, especialmente por meio da teoria da probabilidade e da teoria da decisão. Assim, os sistemas bayesianos e, posteriormente, as redes bayesianas desenvolveram-se como formas de representar relações entre variáveis e apoiar decisões racionais mesmo diante de informações incompletas (PEARL, 1988; RUSSELL; NORVIG, 2010).

A consolidação desses fundamentos, desde a lógica aristotélica até a computabilidade de Turing, passando pela probabilidade, teoria da decisão, entre muitos outros estudos, abriu caminho para o surgimento de métodos mais sofisticados de aprendizado, resultando nas Redes Neurais Artificiais (RNAs) e marcando a transição da simples execução de regras lógicas para a aprendizagem a partir dos dados. Esse avanço representa uma mudança de paradigma no campo da Inteligência

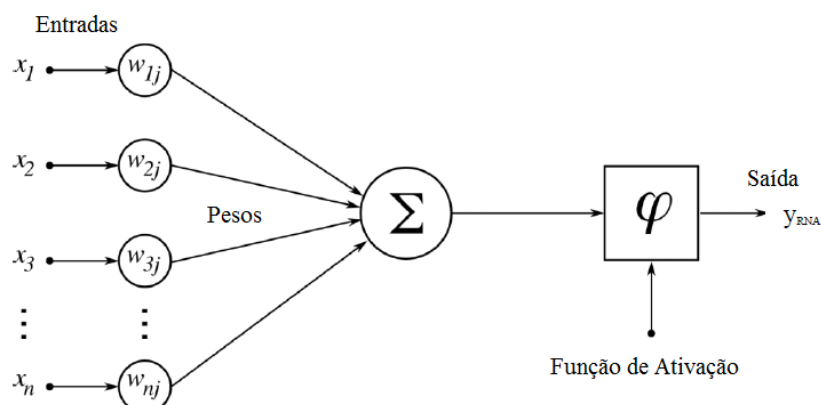
Artificial, ao permitir que sistemas aprendam e tomem decisões com base em padrões complexos extraídos de grandes volumes de dados, ampliando significativamente as possibilidades de aplicação em ciência, indústria e meio ambiente, como na predição e avaliação da qualidade do ar, foco central deste trabalho.

2.2 Redes Neurais Artificiais

No contexto da evolução da Inteligência Artificial, as Redes Neurais Artificiais (RNAs) representam uma tentativa de aproximar o funcionamento das máquinas ao modo como o cérebro humano aprende e processa informações. Essas redes foram inspiradas pelos avanços da neurociência, e surgiram a partir do entendimento de que os neurônios biológicos se comunicam por meio de conexões complexas, transmitindo e ajustando sinais continuamente. Essa dinâmica natural de aprendizado serviu como base para a criação de modelos computacionais capazes de reconhecer padrões e aprimorar seu desempenho, de forma semelhante ao cérebro humano. (RUSSELL; NORVIG, 2010).

De acordo com Filletti (2007), as Redes Neurais Artificiais são compostas por unidades de processamento simples, conhecidas como neurônios artificiais, conectadas entre si por pesos sinápticos que controlam a intensidade das interações. Essas unidades estão organizadas em camadas, sendo que cada camada desempenha um papel distinto no processamento da informação. A primeira camada recebe os dados de entrada, as camadas intermediárias (também chamadas de camadas ocultas) transformam essas informações por meio de combinações ponderadas e funções de ativação, e a última camada gera a saída final. A capacidade da rede de aprender e generalizar decorre do ajuste contínuo dos pesos dessas conexões, permitindo que o modelo extraia relações complexas entre os dados.

Figura 1: Representação de um neurônio artificial



Fonte: Adaptado de Martiniano, 2016

O primeiro modelo formal de neurônio artificial, representado na Figura 1, foi proposto por Warren McCulloch e Walter Pitts (1943), que descreveram uma célula nervosa artificial capaz de realizar operações lógicas simples. Esse modelo considerava que cada neurônio recebia múltiplos sinais de entrada e produzia uma saída binária com base em uma função de ativação, inaugurando a representação matemática do raciocínio humano e abrindo caminho para os primeiros estudos em aprendizado automático. Mais tarde, Frank Rosenblatt (1958) desenvolveu o Perceptron, um modelo de rede neural de camada única capaz de aprender a partir de exemplos, ajustando seus pesos de acordo com os erros observados. O Perceptron foi o primeiro algoritmo de aprendizado supervisionado implementado com sucesso, e, embora limitado a problemas linearmente separáveis, estabeleceu as bases conceituais para os modelos posteriores de redes com múltiplas camadas. (RUSSELL; NORVIG, 2010).

Com o avanço da computação e o aumento da disponibilidade de dados, as RNAs evoluíram para estruturas mais profundas e complexas, dando origem ao *Deep Learning*. Essa nova abordagem amplia o conceito de rede neural ao utilizar múltiplas camadas de processamento, permitindo que o sistema aprenda representações hierárquicas dos dados, das mais simples até as mais abstratas (FILLETTI, 2007; RUSSELL; NORVIG, 2010). Essas múltiplas camadas permitem que sejam construídos diferentes tipos de arquiteturas, que podem variar conforme o tipo de aplicação e a forma como a informação é processada. Existem redes em que o fluxo de dados ocorre apenas em uma direção, das entradas para as saídas, conhecidas

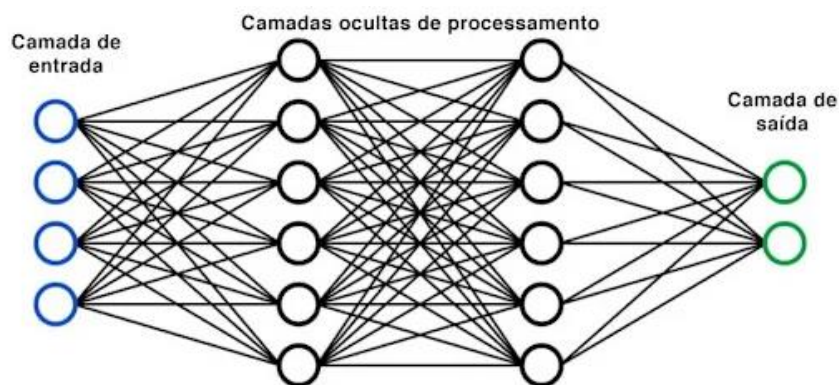
como *feedforward*, e outras que apresentam conexões de realimentação, permitindo que as saídas influenciem novamente as entradas, como nas redes recorrentes. As redes multicamadas ainda podem ser totalmente, parcialmente ou localmente conectadas, de acordo com a forma como os neurônios se interligam. (FILLETTI, 2007)

2.3 Arquitetura de Redes *Feedforward* Multicamadas (MLP)

Entre as diferentes arquiteturas de redes neurais artificiais, a *Multilayer Perceptron* (MLP) se destaca por sua ampla aplicação em tarefas de classificação, regressão e predição, sendo considerada a base de muitos modelos modernos de aprendizado profundo. Essa arquitetura é composta por múltiplas camadas e segue o princípio *feedforward*, tornando o treinamento mais estável e eficiente, já que cada camada processa os dados recebidos e os envia à camada seguinte até que o modelo produza a resposta final. Segundo Filletti (2007, apud HAYKIN, 1999), essa estrutura sequencial permite um fluxo de informação unidirecional e organizado, o que facilita o aprendizado supervisionado, que acontece quando a rede aprende a partir de exemplos cuja resposta correta já é conhecida e ajusta seus pesos para reduzir o erro entre o previsto e o esperado.

A principal diferença entre a MLP e o modelo original de Perceptron, proposto por Rosenblatt em 1958, está justamente na presença dessas camadas ocultas, responsáveis por realizar transformações nos dados e permitir que a rede represente relações não lineares, tornando-a mais poderosa e flexível (RUSSELL; NORVIG, 2010; DEEP LEARNING BOOK BRASIL, 2024).

Figura 2: Representação da estrutura de uma Rede Neural Artificial MLP



Fonte: OPENCADD (2022)

Na MLP, os neurônios que compõem as camadas ocultas recebem combinações ponderadas dos sinais de entrada, aplicam funções de ativação e produzem novas representações que serão usadas pela camada seguinte, sendo que as funções de ativação são as operações que determinam como cada neurônio transforma a informação que recebe. Conforme Filletti (2007, apud HAYKIN, 1999), essas camadas atuam como extratoras de características, sendo responsáveis pela maior parte do processamento. De forma simplificada, as primeiras camadas aprendem características mais simples, enquanto as últimas aprendem relações mais complexas e abstratas, o que fundamenta o conceito de *Deep Learning*.

Para garantir um aprendizado eficiente e evitar que a rede memorize os dados, é fundamental dividir o conjunto de informações em três partes: treinamento, validação e teste. O conjunto de treinamento é usado para ajustar os parâmetros da rede, permitindo que ela reconheça os padrões existentes. O conjunto de validação acompanha o desempenho do modelo durante o treinamento, ajudando a identificar situações de *overfitting*, que acontecem quando a rede se ajusta demais aos dados e perde capacidade de generalização. Por fim, o conjunto de teste é utilizado apenas após o treinamento, avaliando o desempenho real do modelo em dados novos (FILLETTI, 2007; RIBEIRO, 2024).

Essa metodologia é essencial em aplicações práticas, especialmente quando se trabalha com fenômenos dinâmicos e de múltiplas variáveis, como é o caso da classificação da qualidade do ar. Nesse contexto, o comportamento do sistema depende de diversos fatores interligados (meteorológicos, geográficos e de emissão

de poluentes) e, portanto, a arquitetura MLP *feedforward* mostra-se particularmente adequada a esse tipo de problema, pois combina simplicidade estrutural com grande capacidade de aprendizado, produzindo resultados consistentes mesmo diante de variações, incertezas nos dados (FILLETTI, 2007; RIBEIRO, 2024), e aliando clareza conceitual com poder de generalização, sendo uma excelente escolha para aplicações que buscam analisar, prever e compreender sistemas complexos, como é o caso deste trabalho.

2.4 Backpropagation e o Algoritmo de Gradiente Conjugado Escalonado (SCG)

Após a definição da arquitetura MLP, é necessário compreender como ocorre o processo de aprendizado da rede, isto é, o mecanismo pelo qual os pesos são ajustados para reduzir o erro entre as saídas previstas e as desejadas.

O aprendizado supervisionado das Redes Neurais Artificiais (RNAs) é guiado pelo princípio da minimização de erros entre as saídas desejadas e as saídas efetivamente geradas pelo modelo. Para isso, a rede ajusta iterativamente os pesos sinápticos das conexões entre neurônios, buscando reduzir o erro global. Esse processo é realizado pelo algoritmo de retropropagação do erro (*backpropagation*), proposto inicialmente por Rumelhart, Hinton e Williams (1986), e amplamente descrito por Russell e Norvig (2010) como um dos pilares do aprendizado em redes neurais multicamadas.

Segundo a IBM (2024), o *backpropagation* envolve duas fases principais: na propagação direta, os dados de entrada percorrem a rede até gerar uma saída; em seguida, na retropropagação, o erro calculado é transmitido de volta pelas camadas, ajustando os pesos na direção de maior redução do erro. Assim, cada neurônio aprende a “contribuir” para que a rede produza respostas mais precisas ao longo do tempo.

No entanto, de acordo com Filletti (2007), inspirada em Haykin (1999), essa abordagem tradicional do *backpropagation* apresenta limitações importantes, como a dependência de uma taxa de aprendizado fixa, a lenta convergência em funções com

muitos parâmetros e o risco de o algoritmo ficar preso em mínimos locais, o que prejudica a eficiência do treinamento. Para contornar esses problemas, foram desenvolvidos algoritmos de otimização mais robustos, entre os quais se destaca o Gradiente Conjugado Escalonado (SCG), que parte do princípio de busca conjugada, ou seja, sem repetição de caminhos já explorados e sem a necessidade de cálculos diretos da matriz Hessiana, o que exigiria um alto custo computacional. Essa característica faz do SCG um algoritmo de segunda ordem eficiente, capaz de acelerar a convergência e manter boa estabilidade numérica. (LUGO, 2023)

Esse algoritmo se diferencia por ajustar automaticamente o parâmetro de regularização a cada iteração, dispensando o uso de uma taxa de aprendizado fixa, um dos parâmetros mais sensíveis do treinamento neural. Isso permite que o algoritmo controle a amplitude dos passos de atualização dos pesos e garanta equilíbrio entre velocidade e precisão, pois a cada iteração, o progresso alcançado anteriormente é preservado, evitando retrocessos e redundâncias no aprendizado. (LUGO, 2023)

No contexto prático, o SCG tem se mostrado uma das alternativas mais eficientes ao *backpropagation* clássico. Segundo Souto (2024) e Ribeiro (2024), o algoritmo apresenta desempenho comparável em termos de acurácia, mas com custo computacional reduzido e menor tempo de treinamento quando comparado a métodos como Levenberg–Marquardt. Em síntese, a combinação entre o *backpropagation* e o Gradiente Conjugado Escalonado representa uma das mais eficazes estratégias de otimização para redes neurais modernas. Enquanto o primeiro fornece a base conceitual para o aprendizado supervisionado, o segundo aprimora o processo de convergência, garantindo menores custos, maior estabilidade e melhor desempenho preditivo.

3. Metodologia

Nesta seção será apresentada a metodologia adotada para a realização deste estudo, descrevendo as etapas do desenvolvimento do modelo. Primeiramente, será detalhado o tratamento realizado na base de dados, em seguida, será explicada a RNA utilizada, contemplando sua configuração e parâmetros de treinamento. Por fim, serão descritas as métricas de classificação empregadas para avaliar o desempenho do modelo e a qualidade preditiva dos resultados obtidos.

3.1 Tratamento da base de dados

A base de dados utilizada neste trabalho foi obtida do repositório *Kaggle* e continha inicialmente 5.000 amostras. Após a análise do arquivo, foram identificadas amostras com possíveis erros experimentais, como valores inconsistentes e fora dos limites físicos esperados. Essas amostras foram excluídas, resultando em um total de 4.775 registros válidos, utilizados nas etapas de treinamento, validação e teste da rede neural.

Nessa base de dados, a qualidade do ar é classificada em quatro categorias: boa, moderada, ruim e perigosa, conforme apresenta a Tabela 1.

Tabela 1: Quantidade de amostras por categoria

Categoria	Quantidade de amostras
Boa	1983
Moderada	1493
Ruim	930
Perigosa	369

Fonte: A autora (2025) - baseado nos dados de Mateen (2024) após tratamento

Para categorizar a qualidade do ar, são considerados parâmetros meteorológicos, como temperatura e umidade, exemplificados na Tabela 2, concentrações de poluentes, conforme Tabela 3, além de variáveis geográficas e demográficas, como densidade populacional e distância de áreas industriais,

apresentadas na Tabela 4. As amostras estão representadas na sequência de classificação: boa, moderada, ruim e perigosa, conforme a base de dados utilizada.

Tabela 2: Parâmetros meteorológicos utilizados

Amostra	Temperatura (°C)	Umidade (%)
4	27.1	39,1
6	31.0	59.6
3481	37.6	81.2
3502	41.4	65.4

Fonte: A autora (2025) - baseado nos dados de Mateen (2024) após tratamento

Tabela 3: Parâmetros de poluentes atmosféricos utilizados

Amostra	MP2.5 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	MP10 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	NO2 (ppb)	SO2 (ppb)	CO (ppm)
4	6.1	6.3	13.5	5.3	1.15
6	5.0	16.8	24.2	13.6	1.38
3481	28.1	56.6	46.7	13.7	1.85
3502	34.3	52.8	42.7	9.4	1.87

Fonte: A autora (2025) - baseado nos dados de Mateen (2024) após tratamento

Tabela 4: Parâmetros geográficos utilizados

Amostra	Proximidade à áreas industriais (km)	Densidade demográfica (pessoas/km^2)
4	11.1	551
6	6.3	443
3481	4.1	560
3502	2.5	721

Fonte: A autora (2025) - baseado nos dados de Mateen (2024) após tratamento

Para adequação ao modelo de rede neural, foi necessário converter as quatro categorias em uma variável binária para a matriz de saída. Assim, as classes “boa” e “moderada” foram agrupadas como “próprio para respiração” (1,0), e as classes “ruim” e “perigosa” como “impróprio para respiração” (0,1), essas representações estão expostas na Tabela 5.

Tabela 5: Representação binária baseada na classificação da qualidade do ar

Amostra	Qualidade do ar	Classificação	Representação binária (saída)
4	Boa	Própria	1,0
6	Moderada	Própria	1,0
3481	Ruim	Imprópria	0,1
3502	Perigosa	Imprópria	0,1

Fonte: A autora (2025) - baseado nos dados de Mateen (2024) após tratamento

Após o tratamento preliminar dos dados, foi realizada a organização da base em planilha eletrônica (Microsoft Excel). Para estruturar o conjunto de dados de forma compatível ao desenvolvimento da rede neural, foi feita a transposição das informações, de modo que cada parâmetro fosse disposto em uma linha e cada amostra ocupasse uma coluna. Esse formato resultou na matriz de entrada utilizada para o treinamento do modelo.

O mesmo procedimento foi aplicado na geração da matriz de saída, composta pelo número de identificação da amostra, sua classificação de qualidade do ar e a representação binária correspondente.

3.2 A RNA

Como o problema abordado envolve a classificação da qualidade do ar a partir de variáveis meteorológicas, geográficas e de poluentes atmosféricos, o objetivo é que, para cada amostra, a rede estime a probabilidade de pertencimento a cada classe

de qualidade do ar e, a partir disso, realize a decisão final de acordo com a maior probabilidade.

O código utilizado para o treinamento da rede foi baseado em um *script* originalmente gerado pelo MATLAB *Pattern Recognition App* (NNStart), ferramenta pertencente ao *Deep Learning Toolbox*, que automatiza a criação de modelos de classificação por redes neurais. Esse código foi adaptado para a variação da quantidade de neurônios na camada oculta e para a geração de Matrizes de Confusão e Curvas ROC para os conjuntos totais, do conjunto de treinamento, validação e teste, e executado com os dados tratados deste trabalho, possibilitando o ajuste dos principais parâmetros de rede e a análise dos resultados obtidos.

As matrizes de entrada e saída, previamente tratadas, foram carregadas no MATLAB para compor os conjuntos de dados da rede. A matriz de entrada contém as variáveis explicativas (como temperatura, umidade e concentrações de poluentes), enquanto a matriz de saída foi codificada no formato *one-hot*, em que cada classe é representada por um vetor binário exclusivo.

A partir disso, foram realizados testes utilizando o algoritmo SCG por meio da função *trainscg*, e variando o número de neurônios na camada oculta, iniciando em 2 e finalizando em 25 neurônios, de modo a identificar a quantidade que tivesse melhor desempenho e estabilidade. Para todos os testes, as funções de ativação utilizadas foram:

- *tansig* (tangente hiperbólica) na camada oculta, responsável por introduzir não linearidade no modelo e permitir a representação de padrões complexos.
- *softmax* na camada de saída, que transforma os valores numéricos da rede em probabilidades normalizadas, o que possibilita interpretar as saídas como graus de pertencimento de cada amostra às classes analisadas.

Além disso, a função de perda adotada foi a entropia cruzada, que é amplamente empregada em classificações para quantificar a diferença entre as probabilidades previstas pela rede e as verdadeiras, de forma que quanto menor o valor da entropia cruzada, melhor é a correspondência das probabilidades.

Os dados foram divididos automaticamente em três subconjuntos, seguindo a proporção de:

- 70% para treinamento, utilizados na atualização dos pesos da rede;
- 15% para validação, empregados para acompanhar o desempenho e prevenir o sobreajuste;
- 15% para teste, reservados exclusivamente para avaliação final do modelo.

Durante o processo de treinamento, o MATLAB aplica a normalização automática das entradas e utiliza o critério de parada antecipada (*early stopping*). Esse mecanismo monitora o erro do conjunto de validação a cada época e interrompe o treinamento quando o desempenho deixa de melhorar após um número consecutivo de iterações, dessa forma, o modelo final é salvo no ponto em que apresentou melhor desempenho.

A avaliação dos resultados foi feita com base nos gráficos e matrizes geradas pelo próprio MATLAB, que permitem analisar o comportamento e a precisão do modelo:

- **Matrizes de confusão:** mostram a quantidade de acertos e erros de classificação em cada classe, indicando quais categorias são mais confundidas entre si e possibilitando o cálculo das Métricas de Classificação; os resultados são dados em: verdadeiro positivo, verdadeiro negativo, falso positivo e falso negativo.
- **Curvas ROC (*Receiver Operating Characteristic*):** ilustram a relação entre a taxa de verdadeiros positivos e a taxa de falsos positivos, permitindo avaliar a capacidade discriminativa do modelo. A área sob a curva (AUC) indica o grau de separação entre as classes, de forma que quanto mais próxima de 1, melhor a classificação;
- **Gráfico de entropia cruzada (*plotperform*):** apresenta a evolução do erro de treinamento, validação e teste ao longo das épocas, permitindo observar a convergência do modelo e o ponto de interrupção;

- **Histograma de erros (*ploterrhist*):** exibe a distribuição dos erros, auxiliando na detecção de possíveis padrões de erro ou desvios sistemáticos.

Esses resultados, em conjunto, possibilitaram avaliar de forma abrangente o desempenho, a estabilidade dos resultados para os diferentes conjuntos de dados, e a capacidade de generalização do modelo, bem como compreender o comportamento da rede neural frente às variações da quantidade de neurônios utilizada.

3.3 Métricas de classificação

A partir dos gráficos e matrizes obtidas pelo MATLAB, buscou-se avaliar com maior precisão o desempenho da rede neural desenvolvida neste trabalho. Para isso, foram adotadas métricas amplamente utilizadas em problemas de classificação, que permitem analisar diferentes aspectos da performance do modelo. Essas métricas possibilitam uma análise mais completa sobre o equilíbrio entre acertos, erros e a confiabilidade das previsões realizadas. Os cálculos dessas métricas também foram realizados utilizando o MATLAB.

3.3.1 Acurácia

A acurácia representa a proporção total de classificações corretas em relação ao número de amostras avaliadas. É uma métrica intuitiva e de fácil interpretação, mas que, segundo Powers (2008), pode se tornar enganosa quando a base de dados é desbalanceada.

No caso deste trabalho, por exemplo, em que a maior parte das amostras é classificada como “própria”, a rede pode apresentar alta acurácia mesmo errando nas amostras “impróprias”, que são as mais relevantes do ponto de vista ambiental. Por isso, a acurácia serve como um primeiro indicativo de desempenho, mas não deve ser interpretada isoladamente.

Essa métrica é calculada pela seguinte equação:

$$Acurácia = \frac{(TP+TN)}{(TP+TN+FP+FN)} \text{ (Equação 1)}$$

Em que:

TP: verdadeiros positivos

TN: verdadeiros negativos

FP: falsos positivos

FN: falsos negativos

3.3.2 Precisão

A precisão corresponde à proporção de amostras classificadas como positivas que, de fato, pertencem à classe ar próprio para respiração. Em outras palavras, representa o quanto o modelo evita classificar indevidamente como “próprio” amostras que são, na verdade, impróprias.

$$Precisão = \frac{TP}{(TP+FP)} \text{ (Equação 2)}$$

Quando temos valores altos de precisão significa que, se o modelo apontar uma condição de ar inadequada, há grande chance de que isso seja verdadeiro.

3.3.3 Sensibilidade

Já a sensibilidade (ou recall) expressa a capacidade do modelo de identificar corretamente os casos de ar próprio para respiração. Na prática, um valor elevado de sensibilidade indica que o modelo consegue identificar praticamente todos os episódios críticos, ainda que ocasionalmente possa gerar falsos resultados. Seu resultado é dado pela Equação 3:

$$Sensibilidade = \frac{TP}{(TP+FN)} \text{ (Equação 3)}$$

3.3.4 Especificidade

Complementarmente, a especificidade avalia o desempenho da rede na outra extremidade da classificação, mostrando a proporção de casos negativos (ar “impróprio”) corretamente reconhecidos. Ela é fundamental para medir a capacidade do modelo de evitar falsos positivos e é dada por:

$$Especificidade = \frac{TN}{(TN+FP)} \text{ (Equação 4)}$$

Um bom desempenho em especificidade garante que o sistema seja confiável, evitando que previsões incorretas prejudiquem sua credibilidade.

3.3.5 F1 Score

O F1-Score, por sua vez, representa a média harmônica entre precisão e sensibilidade, sintetizando em um único valor o equilíbrio entre identificar corretamente os casos positivos e evitar falsos resultados. Powers (2008) destaca que essa métrica normaliza a taxa de verdadeiros positivos em relação às médias das ocorrências, reduzindo os efeitos do desbalanceamento entre classes. Isso é feito por meio da equação:

$$F1 - Score = 2x \frac{(Precisão \times Sensibilidade)}{(Precisão+Sensibilidade)} \text{ (Equação 5)}$$

No presente estudo, o F1-Score foi particularmente útil para avaliar o desempenho global da rede, já que traduz de forma equilibrada a relação entre confiança e abrangência nas previsões, assim, ele mostra se o modelo está acertando por completo ou se ainda está sacrificando uma métrica para melhorar a outra.

3.3.6 AUC

Por fim, a Área sob a Curva ROC (AUC) mede o desempenho geral da classificação independentemente de qualquer limiar de decisão. A curva ROC relaciona a taxa de verdadeiros positivos (TPR) e a taxa de falsos positivos (FPR) para cada uma das iterações realizadas pela RNA, e a AUC corresponde à área sob essa curva, de forma que, quanto mais próxima de 1, melhor a capacidade de distinção entre as classes. Sua equação é:

$$AUC = \frac{(TPR - FPR + 1)}{2} \text{ (Equação 6)}$$

De acordo com Powers (2008), o AUC é uma métrica robusta e menos sensível a desequilíbrios de classe, refletindo a habilidade do modelo em separar amostras de ar “próprios” de “impróprios” de forma consistente.

Na análise deste trabalho, essa métrica foi essencial para avaliar o comportamento geral da rede neural, permitindo verificar se o aprendizado do modelo reflete uma diferenciação real dos padrões e não apenas um ajuste circunstancial.

De forma geral, cada uma dessas métricas traz uma visão complementar sobre o desempenho da rede, permitindo uma avaliação muito mais sólida e interpretável do comportamento da rede neural, tanto sob o ponto de vista estatístico quanto prático, o que é fundamental para validar o modelo como uma ferramenta de apoio à análise da qualidade do ar.

4. Resultados e Discussão

A partir da análise dos gráficos e matrizes gerados nos testes realizados com variação de 2 a 25 neurônios na camada oculta, verificou-se que o aumento do número de neurônios não resultou em melhorias significativas no desempenho da rede, dado que o modelo com 2 neurônios na camada oculta resultou em um F1 Score de 0.9797 e AUC de 0.9575; com 15 neurônios resultou em um F1 Score de 0.9797 e AUC de 0.9579, enquanto com 25 neurônios resultou em um F1 Score de 0.9821 e AUC de 0.9625. Diante disso, optou-se por concentrar a análise nas configurações entre 2 e 7 neurônios, de modo a examinar com maior precisão o comportamento da RNA em relação à base de dados utilizada, considerando tanto o desempenho global do modelo quanto os resultados obtidos separadamente nos conjuntos de treinamento, validação e teste. Os resultados estão dispostos nas tabelas 6, 7, 8 e 9:

Tabela 6: Métricas de classificação do conjunto total

Neurônios	2	3	4	5	6	7
Acurácia	0.9703	0.9730	0.9705	0.9661	0.9690	0.9692
Precisão	0.9744	0.9764	0.9755	0.9726	0.9711	0.9735
Sensibilidade	0.9850	0.9868	0.9842	0.9810	0.9868	0.9845
Especificidade	0.9307	0.9361	0.9338	0.9261	0.9215	0.9284
F1 Score	0.9797	0.9815	0.9798	0.9768	0.9789	0.9790
AUC	0.9575	0.9614	0.9590	0.9536	0.9541	0.9564

Fonte: A autora (2025)

Tabela 7: Métricas de classificação do conjunto de treinamento

Neurônios	2	3	4	5	6	7
Acurácia	0.9719	0.9734	0.9713	0.9671	0.9704	0.9671
Precisão	0.9774	0.9780	0.9768	0.9729	0.9690	0.9710
Sensibilidade	0.9838	0.9857	0.9840	0.9818	0.9909	0.9845
Especificidade	0.9408	0.9401	0.9371	0.9290	0.9161	0.9191
F1 Score	0.9806	0.9818	0.9804	0.9773	0.9798	0.9777
AUC	0.9623	0.9629	0.9605	0.9554	0.9535	0.9518

Fonte: A autora (2025)

Tabela 8: Métricas de classificação do conjunto de validação

Neurônios	2	3	4	5	6	7
Acurácia	0.9665	0.9721	0.9791	0.9679	0.9637	0.9721
Precisão	0.9691	0.9722	0.9833	0.9758	0.9714	0.9781
Sensibilidade	0.9870	0.9906	0.9888	0.9813	0.9789	0.9820
Especificidade	0.9034	0.9194	0.9497	0.9282	0.9231	0.9488
F1 Score	0.9780	0.9813	0.9861	0.9786	0.9751	0.9801
AUC	0.9452	0.9550	0.9693	0.9547	0.9510	0.9654

Fonte: A autora (2025)

Tabela 9: Métricas de classificação do conjunto de teste

Neurônios	2	3	4	5	6	7
Acurácia	0.9665	0.9721	0.9581	0.9595	0.9679	0.9763
Precisão	0.9663	0.9727	0.9609	0.9680	0.9810	0.9810
Sensibilidade	0.9885	0.9881	0.9801	0.9772	0.9755	0.9866
Especificidade	0.9072	0.9336	0.9065	0.9101	0.9462	0.9485
F1 Score	0.9773	0.9804	0.9704	0.9726	0.9782	0.9838
AUC	0.9479	0.9609	0.9433	0.9436	0.9609	0.9675

Fonte: A autora (2025)

Analisando as métricas, nota-se que o melhor modelo foi o de 3 neurônios na camada oculta, pois apresentou melhor equilíbrio entre desempenho e capacidade de generalização, destacando-se entre todos os conjuntos de amostras. No conjunto total, esse modelo obteve F1 Score de 0,9815, AUC de 0,9614 e acurácia de 0,9730, além de manter alta precisão (0,9764), sensibilidade (0,9868) e especificidade

(0,9361), valores que refletem tanto a capacidade de acerto quanto a estabilidade do modelo para os conjuntos de treinamento, validação e teste, sem necessidade de maior complexidade por meio do aumento da quantidade de neurônios.

Nos diferentes conjuntos, o desempenho manteve-se uniforme: F1 Score de 0,9818 no treinamento, 0,9813 na validação e 0,9804 no teste, apresentando baixíssima variação, o que indica robustez.

Embora outras configurações apresentem picos pontuais, como 4 neurônios com F1 Score ligeiramente superior no conjunto de validação (0,9861) e 7 neurônios com maior valor no conjunto de teste (0,9838), ambas mostraram maior oscilação entre os conjuntos, o que compromete a consistência dos resultados. Assim, o modelo de três neurônios se mantém como o mais equilibrado, entregando as melhores métricas em todos os cenários.

A métrica F1 Score foi adotada como principal critério de decisão por equilibrar precisão e sensibilidade, oferecendo uma visão mais realista do desempenho em bases desbalanceadas, como a utilizada neste estudo. A AUC, usada como métrica complementar, reforçou a alta capacidade de separação entre as classes.

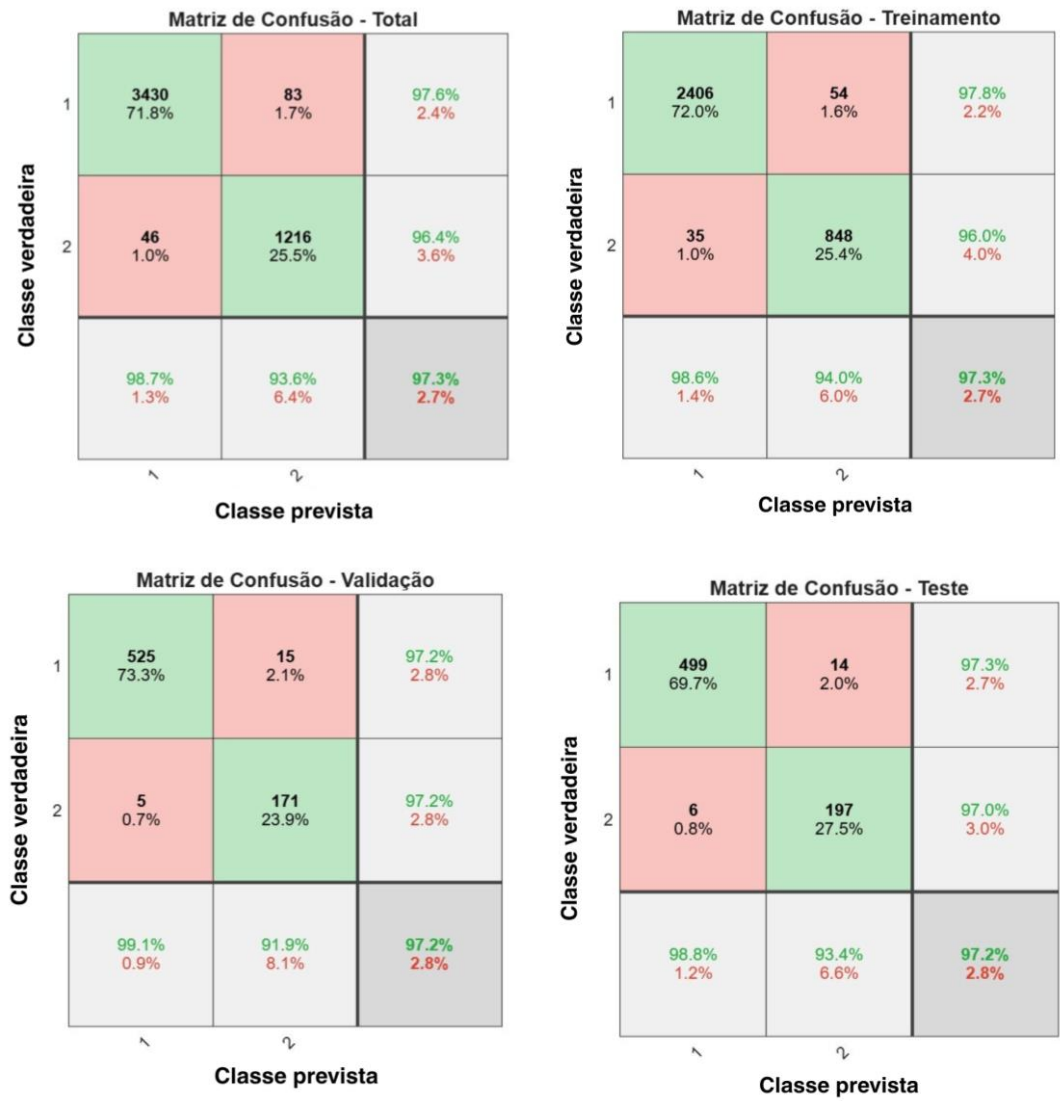
A análise das matrizes de confusão (Figura 3) referentes ao modelo com três neurônios confirma o comportamento consistente identificado pelas métricas numéricas. Em todos os conjuntos, a rede apresentou altas taxas de acerto e baixo número de classificações incorretas, evidenciando um aprendizado eficaz e capacidade de generalização.

No conjunto total, observa-se que 97,6% das amostras da classe 1 e 96,4% da classe 2 foram corretamente classificadas, demonstrando que o modelo é capaz de distinguir com elevada precisão as amostras de ar próprio e impróprio, mantendo equilíbrio entre as classes e evitando tendência de predição para a classe majoritária. Além disso, os índices de acerto global (97,3%) e o baixo percentual de falsos positivos e falsos negativos reforçam a confiabilidade da classificação.

Os demais conjuntos confirmam essa tendência. No treinamento, o modelo alcançou 97,8% de acertos na classe 1 (própria para respiração) e 96,0% na classe 2 (imprópria para respiração), mostrando que aprendeu de forma adequada, sem

indícios de *overfitting*. No conjunto de validação, os resultados se mantiveram praticamente idênticos (97,2% em ambas as classes), o que indica estabilidade do aprendizado mesmo fora do conjunto usado para ajuste de pesos. Por fim, no teste, o desempenho segue o mesmo padrão, com 97,3% e 97,0% de acertos, comprovando a generalização do modelo diante de novos dados.

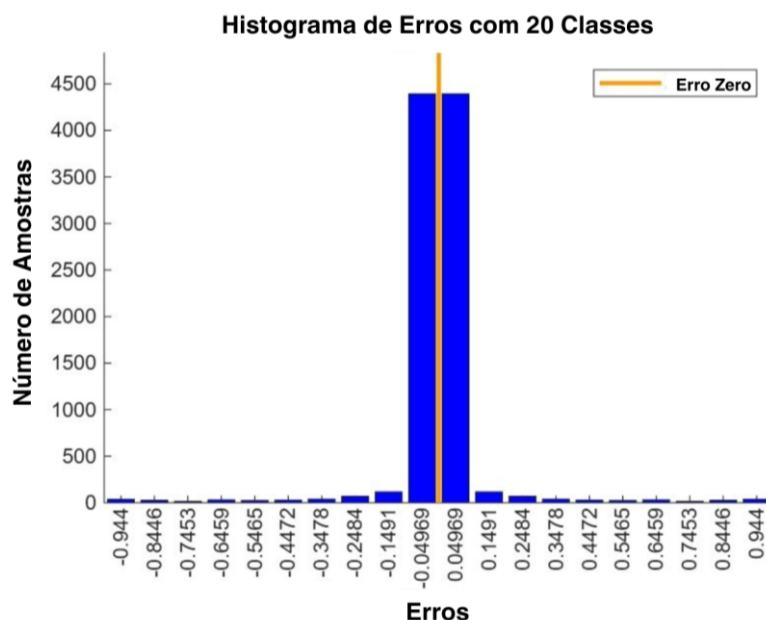
Figura 3: Matrizes de confusão dos conjuntos de treinamento, validação e teste, bem como do conjunto total, com 3 neurônios na camada oculta



Fonte: A autora (2025)

Além da análise das matrizes, também é possível notar a baixa incidência de erros da RNA por meio do histograma de erros gerado pelo MATLAB, representado na Figura 4.

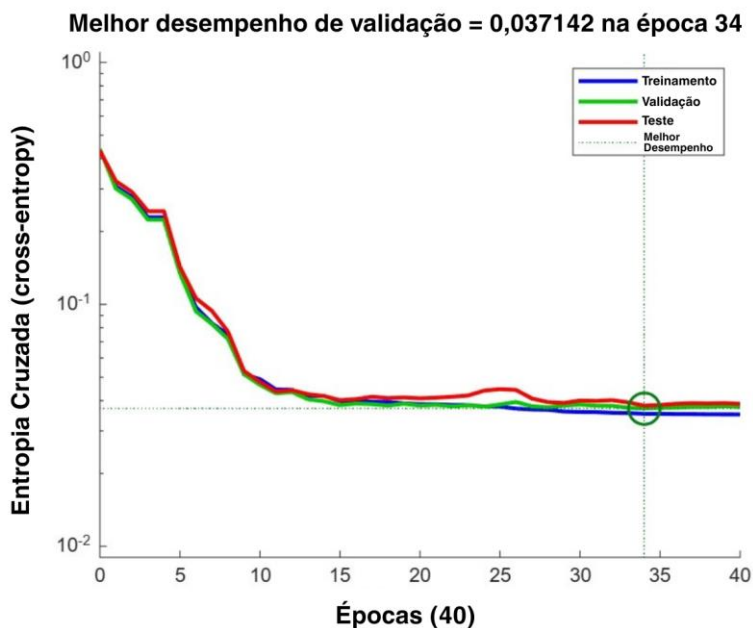
Figura 4: Histograma de erros da RNA com 3 neurônios na camada oculta



Fonte: A autora (2025)

Esse histograma mostra uma concentração acentuada em torno do erro zero, com a maioria das previsões apresentando desvios mínimos, o que indica alta precisão e baixo erro residual. Nota-se que a distribuição é simétrica, bem centrada e com poucas ocorrências nos extremos, evidenciando um comportamento equilibrado e bem ajustado. Além disso, o comportamento observado no histograma de erros é coerente com o desempenho apresentado no gráfico de entropia cruzada, conforme Figura 5. A forte concentração dos erros próximos de zero reflete a baixa função de perda registrada durante o treinamento, que atinge uma certa estabilidade por volta da época 34, com valor mínimo de 0,0371. Essa correspondência entre a distribuição dos erros e a curva de desempenho indica que o modelo atingiu convergência de forma eficiente, mantendo valores reduzidos de erro em todas as etapas.

Figura 5: Desempenho da RNA com 3 neurônios na camada oculta



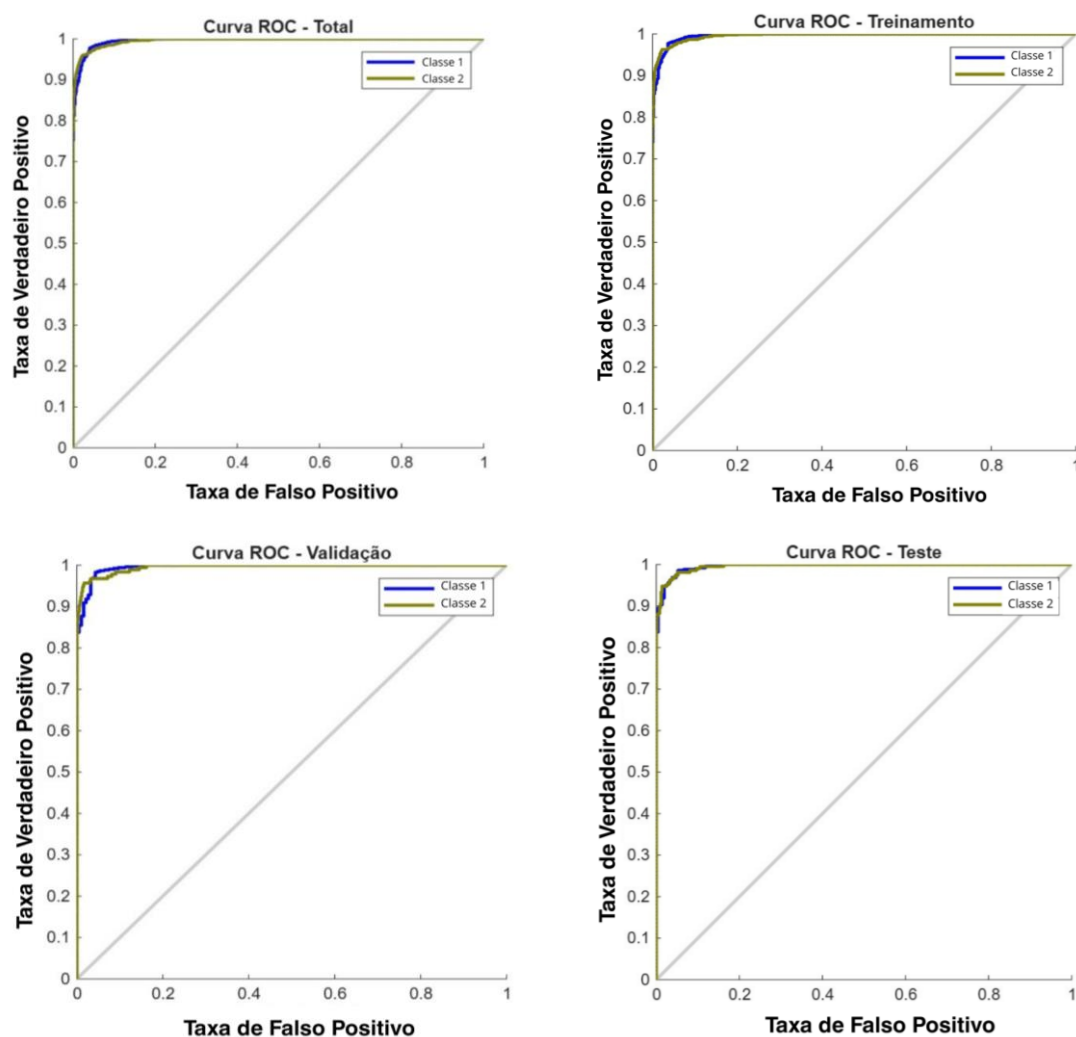
Fonte: A autora (2025)

Finalmente, analisando as curvas ROC, na Figura 6, podemos observar a sensibilidade da rede neural, afinal, ela permite verificar a capacidade de distinção do modelo por meio da relação entre a taxa de verdadeiros positivos (eixo Y) e falsos positivos (eixo X). Quando uma curva ROC se aproxima do canto superior esquerdo do gráfico, como é o caso das curvas geradas neste trabalho, entende-se que o modelo está próximo da sensibilidade ideal, ou seja, possui elevada capacidade discriminatória.

As curvas ROC obtidas no MATLAB demonstram um bom desempenho em todos os conjuntos analisados (treinamento, validação, teste e total). A semelhança entre as curvas das diferentes classes e a proximidade delas da diagonal superior confirmam que a rede conseguiu distinguir com precisão as duas categorias de qualidade do ar, sem favorecimento de classe. Além disso, há uma certa sobreposição das curvas entre os conjuntos, evidenciando que o desempenho se manteve estável durante todo o processo, do treinamento ao teste, reforçando a boa generalização do modelo.

Essas observações são coerentes com o AUC médio superior a 0,96, obtido nas métricas numéricas, e complementam as análises anteriores: o histograma de erros, o gráfico de entropia cruzada e as matrizes de confusão. Em conjunto, as curvas ROC confirmam que o modelo com três neurônios apresenta alta precisão, sensibilidade e robustez, sendo um modelo adequado para a classificação da qualidade do ar.

Figura 6: Curvas ROC da RNA com 3 neurônios na camada oculta para os conjuntos de treinamento, validação, teste e conjunto total



Fonte: A autora (2025)

5. Considerações finais

Os resultados obtidos neste trabalho mostram que, mesmo com uma arquitetura simples, o modelo de Rede Neural Artificial foi capaz de atingir altos índices de desempenho e generalização, classificando a qualidade do ar com precisão, estabilidade e baixa incidência de erros. A rede com três neurônios na camada oculta se destacou não apenas pelas melhores métricas, mas também pela sua eficiência computacional, o que reforça que bons resultados não dependem, necessariamente, de modelos complexos ou de alto custo de processamento.

Esse resultado dialoga com a reflexão proposta por Sara Baase em *A Gift of Fire* (2012), ao destacar que o verdadeiro avanço tecnológico não está em fazer sistemas cada vez maiores ou mais sofisticados, mas em usar a tecnologia de forma inteligente, ética e equilibrada, buscando eficiência sem desperdício de recursos. O desempenho alcançado neste estudo, mesmo com uma configuração reduzida, mostra que a simplicidade bem fundamentada pode ser poderosa, especialmente em aplicações científicas e ambientais, nas quais custo e sustentabilidade também são fatores de decisão.

A partir desses resultados, sugere-se como próximos passos deste trabalho expandir os testes da RNA considerando novas variáveis, como a proximidade de áreas industriais e a densidade demográfica. Essas variações podem tornar o modelo ainda mais útil e preditivo, permitindo que engenheiros químicos avaliem o impacto potencial de novas plantas industriais sobre a qualidade do ar antes mesmo de sua implantação. Além disso, o uso do parâmetro de densidade demográfica pode oferecer indicadores valiosos para políticas públicas, auxiliando gestores a priorizar regiões mais vulneráveis e a planejar cidades de forma mais sustentável.

Portanto, este trabalho não apenas comprova a aplicabilidade das Redes Neurais Artificiais na análise da qualidade do ar, mas também propõe um caminho de integração entre ciência, tecnologia e responsabilidade social. O modelo desenvolvido demonstra que é possível unir eficiência técnica, propósito ambiental e visão humana, contribuindo para uma engenharia química cada vez mais preditiva, sustentável e orientada ao bem coletivo.

6. Referências Bibliográficas

BAASE, S. *A Gift of Fire: Social, Legal, and Ethical Issues for Computing Technology*. 4. ed. Boston: Pearson, 2012. Disponível em <https://www.philadelphia.edu.jo/academics/lalqoran/uploads/A-Gift-of-Fire-4thEd-2012.pdf>. Acesso em 29 out. 2025

BRASIL. Ministério da Saúde. *Vigilância em Saúde Ambiental e Qualidade do Ar (VIGIAR)*. Brasília, DF: Ministério da Saúde, 2021. Disponível em: https://bvsms.saude.gov.br/bvs/publicacoes/poluicao_atmosferica_SUS_saude_ambiental.pdf. Acesso em: 12 abr. 2025.

CETESB – COMPANHIA AMBIENTAL DO ESTADO DE SÃO PAULO. *Relatório de Qualidade do Ar no Estado de São Paulo – 2023*. São Paulo: CETESB, 2023. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/ar/wp-content/uploads/sites/28/2024/08/Relatorio-de-Qualidade-do-Ar-no-Estado-de-Sao-Paulo-2023.pdf>. Acesso em: 5 jun. 2025.

DEEP LEARNING BOOK BRASIL. *As principais arquiteturas de redes neurais*. 2024. Disponível em: <https://www.deeplearningbook.com.br/as-principais-arquiteturas-de-redes-neurais/>. Acesso em: 4 nov. 2025.

FILLETTI, E. R. *Desenvolvimento de modelos neurais para o processamento de sinais acústicos visando a medição de propriedades topológicas em escoamentos multifásicos*. 2007. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.

HEI – HEALTH EFFECTS INSTITUTE. *State of Global Air 2024*. Boston: HEI, 2024. Disponível em: <https://www.stateofglobalair.org/resources/report/state-global-air-report-2024>. Acesso em: 9 mar. 2025.

IBM. *Backpropagation: o algoritmo por trás das redes neurais*. 2024. Disponível em: <https://www.ibm.com/br-pt/think/topics/backpropagation>. Acesso em: 5 nov. 2025.

IEMA – INSTITUTO DE ENERGIA E MEIO AMBIENTE. *Brasil precisa de no mínimo mais 46 estações de monitoramento da qualidade do ar, aponta estudo do IEMA*. 2024. Disponível em: <https://energiaeambiente.org.br/brasil-precisa-de-no-minimo->

mais-46-estacoes-de-monitoramento-da-qualidade-do-ar-aponta-estudo-do-iema-20240227. Acesso em: 21 mai. 2025.

LUGO, Y. O. *Aplicação de redes neurais na prospecção de novas formas sólidas de agentes bioativos*. 2025. Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Instituto de Química de Araraquara, Araraquara, 2025.

MARTINIANO, A.; FERREIRA, R. P.; FERREIRA, A.; FERREIRA, A.; SASSI, R. J. *Utilizando uma rede neural artificial para aproximação da função de evolução do sistema de Lorentz*. 2016. DOI: 10.32358/rpd.2016.v2.94.

MATEEN, M. *Air Quality and Pollution Assessment*. 4 dez. 2024. Disponível em: <https://www.kaggle.com/datasets/mujtabamatin/air-quality-and-pollution-assessment>. Acesso em: 25 fev. 2025.

MONITORAMENTO da qualidade do ar. *Excelência Ambiental*. [S. l.], 2025. Disponível em: <https://excelenciaambiental.com.br/monitoramento-da-qualidade-do-ar-2/>. Acesso em: 14 mar. 2025.

NATIONAL GEOGRAPHIC BRASIL. *Como a poluição do ar está ligada ao câncer de pulmão*. National Geographic Brasil, 17 nov. 2022. Disponível em: <https://www.nationalgeographicbrasil.com/meio-ambiente/2022/11/como-a-poluicao-do-ar-esta-ligada-ao-cancer-de-pulmao>. Acesso em: 09 dez. 2025

OPENCADD Advanced Technology. “Redes neurais e avanços tecnológicos: o que têm em comum?”, 21 set. 2022. Disponível em: <https://www.opencadd.com.br/blog/redes-neurais-e-avancos-tecnologicos>. Acesso em: 01 nov. 2025.

PEARL, J. *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems: Networks of Plausible Inference*. San Mateo: Morgan Kaufmann, 1988. Disponível em <https://theswissbay.ch/pdf/Gentoomen%20Library/Artificial%20Intelligence/Bayesian%20networks/Judea%20Pearl%20-%20Probabilistic%20Reasoning%20in%20Intelligent%20Systems.pdf>. Acesso em: 05 nov. 2025

POWERS, D. M. Evaluation: From Precision, Recall and F-Factor to ROC, Informedness, Markedness & Correlation. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/228529307_Evaluation_From_Precision_Recall_and_F-Factor_to_ROC_Informedness_Markedness_Correlation. Acesso em 6 nov. 2025.

RIBEIRO, L. B. M. *Classificação de vidros com base no teor de óxidos utilizando redes neurais artificiais*. 2024. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) – Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Araraquara, 2024.

RUSSELL, S. J.; NORVIG, P. *Artificial Intelligence: A Modern Approach*. 3. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2010.

SMITH, R. *A Lógica de Aristóteles*. Tradução de Elton Luiz Rasch. Revisão de Frank Thomas Sautter e Rogério Passos Severo. *Investigação Filosófica*, Macapá: Universidade Federal do Amapá, v. 3, n. 2, artigo digital 2, 2012. Disponível em: <https://core.ac.uk/display/233924488>. Acesso em: 03 nov. 2025.

SICFLUX. *Monitoramento da qualidade do ar no Brasil: panorama e desafios*. [S. l.]: Sicflux, 2025. Disponível em: <https://sicflux.com.br/blog/monitoramento-da-qualidade-do-ar-no-brasil-panorama-e-desafios/>. Acesso em: 3 mai. 2025.

SOUTO, A. C. *Análise comparativa de redes neurais na previsão de intensidade de sinal de televisão digital na faixa de UHF (572 a 578 MHz) na cidade de Araguari*. 2024. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) – Faculdade de Engenharia Elétrica, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2024.

VORMITTAG, E. M. P. A. et al. Análise do monitoramento da qualidade do ar no Brasil. *Estudos Avançados*, v. 35, n. 102, 2021. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/ea/a/fbCFjRbBRhf4M5F6xQVrbfR/>. Acesso em: 27 mar. 2025.

WHO – WORLD HEALTH ORGANIZATION. *Ambient (Outdoor) Air Pollution*. Geneva: WHO, 2024. Disponível em: [https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/ambient-\(outdoor\)-air-quality-and-health](https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/ambient-(outdoor)-air-quality-and-health). Acesso em: 15 abr. 2025.

WRI BRASIL. *O Estado da Qualidade do Ar no Brasil*. São Paulo: World Resources Institute, 2021. Disponível em: https://www.wribrasil.org.br/sites/default/files/wri-o-estado-da-_qualidade-do-ar-no-brasil.pdf. Acesso em: 8 mai. 2025.