

## ALGORITMO DE INVERSÃO PARA CÁLCULO DA CONCENTRAÇÃO DE COMPONENTES ATMOSFÉRICOS

**Isadora Tairinne de Sena Bastos; Germano Pinto Guedes**

1. Universidade Estadual de Feira de Santana, Bolsista PROBIC, Graduando em Física, e-mail: isadoratairinne@gmail.com
2. Universidade Estadual de Feira de Santana, Orientador, Departamento de Física, e-mail: germano.uefs@gmail.com

**PALAVRAS-CHAVE:** *Absorção atmosférica, Espectro solar, Concentração de gases,*

### INTRODUÇÃO

A radiação solar ao atravessar atmosfera terrestre sofre inúmeras interações com as partículas e gases que a compõem sendo, assim, atenuada pelos múltiplos espalhamentos e/ou absorções que causam alterações no espectro solar extraterrestre, ocasionando o aparecimento de linhas e bandas de absorção específicas, como uma impressão digital, compatível com a concentração de cada um dos componentes opticamente ativos das diferentes camadas atmosféricas, como ilustra a Fig. 1.

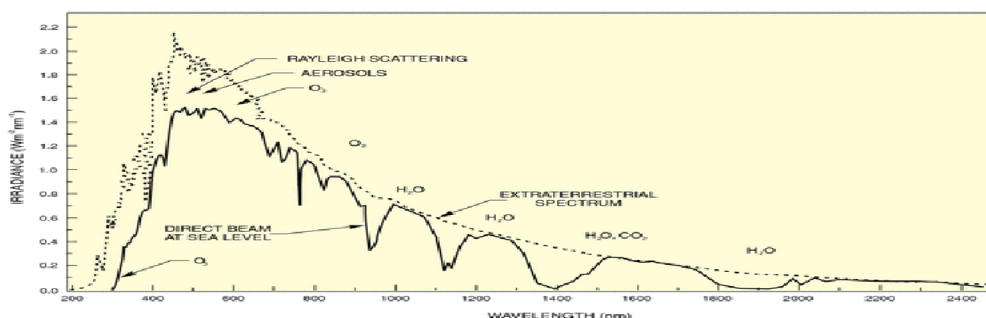


Figura 1: Comparação entre o espectro solar extraterrestre para uma atmosfera padrão ao nível do mar e um espectro de corpo negro de 6000 K. As regiões hachuradas representam as absorções moleculares na atmosfera.

Fonte: <http://www.newport.com/Introduction-to-Solar-Radiation/411919/1033/content.aspx>.

O espalhamento da radiação na atmosfera terrestre ocorre de duas maneiras principais: os espalhamentos Rayleigh e Mie. No primeiro, a interação da onda eletromagnética se dá com pequenas moléculas atmosféricas e outras pequenas partículas cujos diâmetros sejam bem menores que o comprimento de onda da radiação incidente; por outro lado, o espalhamento Mie ocorre quando a onda eletromagnética incide em partículas com dimensões maiores que o seu comprimento de onda, o que normalmente ocorre com aerossóis.

Quanto aos processos de absorção, as principais bandas presentes no espectro da radiação solar são devido às moléculas de  $O_2$ ,  $O_3$ ,  $CO_2$  e  $H_2O$ . Destas, as moléculas de oxigênio ( $O_2$ ) e ozônio ( $O_3$ ) possuem suas bandas de absorção basicamente nas regiões do visível e do ultravioleta. A molécula de vapor de água ( $H_2O$ ) apresenta suas bandas de absorção na faixa de  $0,7\mu\text{m}$  até  $3\mu\text{m}$  (infravermelho) e o  $CO_2$  absorve fortemente na região do infravermelho, de  $0,7\mu\text{m}$  a  $1\mu\text{m}$  (Fig. 1.)

O espectro solar que chega a superfície terrestre (Fig. 1) resultante destas interações pode ser obtido utilizando um espectrômetro ou pode ser calculado através de modelos de transmissão atmosférica, como o SPCTRAL 2 (BIRD & RIODAN, 1986), este modelo traz uma expressão para o cálculo da radiação direta em função do comprimento de onda  $\lambda$ , como um aprimoramento da lei de Beer–Lambert.

Assim, de uma forma geral, a intensidade do espectro solar na superfície terrestre para o comprimento de onda  $\lambda$  é calculada pela expressão:

$$I_d(\lambda) = H_0(\lambda) \cdot D \cdot T_r(\lambda) \cdot T_a(\lambda) \cdot T_W(\lambda) \cdot T_o(\lambda) \cdot T_u(\lambda) \tag{2}$$

onde,  $H_{0\lambda}$  é o espectro da radiação extraterrestre Neckel e Labs (BIRD & RIODAN, 1986),  $D$  é o fator para correção da distância Terra-Sol,  $T_r(\lambda)$ ,  $T_a(\lambda)$ ,  $T_W(\lambda)$ ,  $T_o(\lambda)$  e  $T_u(\lambda)$  são funções de transmitância da atmosfera no comprimento de onda  $\lambda$  para espalhamento Rayleigh, atenuação de aerossol, absorção por vapor d’água, absorção por ozônio e absorção por gases uniformemente misturados, respectivamente. Escrevendo o espectro de radiação direta  $I_d(\lambda)$  com as funções de transmitância teremos:

$$I_d(\lambda) = H_0(\lambda) \cdot D \cdot e^{-\frac{M \cdot p}{p_0} \left[ 115,6406 - \frac{1,335}{\lambda^2} \right]} \cdot e^{-\alpha_0(\lambda) \cdot O_3 \cdot M_0} \cdot e^{-\tau_{0,5} \left( \frac{\lambda}{0,5} \right)^{-\alpha}} \cdot W \cdot e^{-\frac{0,2385 \cdot a_W(\lambda) \cdot W \cdot M}{(1+20,07 \cdot a_W(\lambda) \cdot W \cdot M)^{0,45}}} \cdot e^{-\frac{1,41 \cdot a_u(\lambda) \cdot M \cdot p / p_0}{(1+118,93 \cdot a_u(\lambda) \cdot M \cdot p / p_0)^{0,45}}} \tag{3}$$

Onde os parâmetros  $a_k(\lambda)$  representam os coeficientes de absorção espectral, sendo  $\alpha_0(\lambda)$  é o coeficiente de absorção do ozônio,  $a_W(\lambda)$  é o coeficiente de absorção do vapor de água e  $a_u(\lambda)$  é o coeficiente de absorção do ozônio. Temos também os parâmetros de concentração do ozônio ( $O_3$ ), concentração do vapor de água ( $W$ ) e para o tamanho dos aerossóis ( $\alpha$ ) e a turbidez atmosférica (profundidade ótica dos aerossóis em um caminho vertical) para o comprimento de onda de  $0,5 \mu m$  ( $\tau_{0,5}$ ).

O efeito global no espectro calculado  $I_d(\lambda)$  é resultado de cada um destes processos agindo independente e simultaneamente, criando linhas e bandas de absorção tão profundas quanto maior seja a concentração de cada um destes elementos na atmosfera, ou seja, diminuindo a transmitância da radiação de acordo com o aumento da concentração dos componentes atmosféricos opticamente ativos (BASTOS & GUEDES, 2011) Usamos este fato para inferir no sentido inverso: uma vez conhecido (medido) o espectro solar na superfície da terra  $I_d(\lambda)$ , estudamos regiões de absorção específicas de cada um destes gases para monitorar a concentração destes componentes atmosféricos. Invertendo-a encontramos a concentração do vapor de água, do ozônio, o tamanho dos aerossóis e a turbidez atmosférica (que está relacionada com a saturação dos aerossóis).

Para isto, utilizamos o algoritmo que inverte as equações do SPCTRAL 2 (SOARES, 2010) que consiste em utilizar a Eq.(3), que tem como parâmetros de entrada as concentrações de gases da atmosfera e o espectro solar extraterrestre  $H_0(\lambda)$  e invertê-la de forma que encontraremos:

$$C_1(\lambda) = C_2(\lambda) \cdot O_3 + \tau_{0,5} \cdot \left( \frac{\lambda}{0,5} \right)^{-\alpha} + \frac{C_3(\lambda) \cdot W}{(1+C_4(\lambda) \cdot W)^{0,45}} \tag{4}$$

$$\text{Onde } C_1(\lambda) = \frac{1}{M} \ln \left( \frac{H_0(\lambda) \cdot D}{I_d(\lambda)} \right) - \frac{p}{p_0} \left\{ \frac{1}{\lambda^4 \cdot \left[ 115,6406 - \frac{1,335}{\lambda^2} \right]} + \frac{1,41 \cdot a_u(\lambda)}{\left( 1 + 118,93 \cdot a_u(\lambda) \cdot M \cdot \frac{p}{p_0} \right)^{0,45}} \right\}$$

$$C_2(\lambda) = \alpha_0(\lambda) \cdot \frac{M_0}{M}, \quad C_3(\lambda) = 0,2385 \cdot a_W(\lambda) \quad \text{e} \quad C_4(\lambda) = 20,07 \cdot a_W(\lambda) \quad \text{são constantes}$$

pois os valores dos coeficientes de absorção dos coeficientes de absorção para o vapor de água, gases uniformemente misturados e ozônio são conhecidos, como mostra Tabela 1.

Tabela 1- Valores de parâmetros para o método de inversão.

Nº	NW	$\lambda(\mu m)$	$\alpha_0(\lambda)$	$a_W(\lambda)$	$a_u(\lambda)$
1	11	0,430	0,000	0,000	0,000
2	22	0,540	0,000	0,075	0,000

3	24	0,780	0,000	0,012	0,000
4	51	0,937	55,000	0,000	0,000

Onde  $NW$  é o número do comprimento de onda que será utilizado (BIRD & RIODAN, 1986) e os outros parâmetros já foram supracitados. Utilizando a Tab. 1 e a Eq. (4) podemos obter o sistema abaixo (SOARES, 2010):

$$\alpha = \frac{\ln(C_1(\lambda_2) - C_2(\lambda_2) \cdot O_3) - \ln(C_2(\lambda_2))}{\ln(\lambda_1) - \ln(\lambda_2)} \quad (5)$$

$$\tau_{0,5} = C_1(\lambda_1) \cdot \left(\frac{\lambda_1}{0,5}\right)^{\frac{\ln(C_1(\lambda_2) - C_2(\lambda_2) \cdot O_3) - \ln(C_2(\lambda_2))}{\ln(\lambda_1) - \ln(\lambda_2)}} \quad (6)$$

$$O_3 = \frac{C_1(\lambda_2) - \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{-\alpha} \cdot C_1(\lambda_1)}{C_2(\lambda_2) - \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{-\alpha} \cdot C_2(\lambda_1)} \quad (7)$$

$$\frac{C_3(\lambda_4) \cdot W}{(1 + C_4(\lambda_4) \cdot M)^{0,45}} = C_1(\lambda_4) - C_1(\lambda_1) \cdot \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_4}\right)^{\alpha} \quad (8)$$

Onde as constantes são obtidas de maneira recursiva, iniciando o algoritmo pela Eq. (5), considerando o valor inicial para a concentração de ozônio nula e assim calculamos o valor aproximado de  $\alpha$ , a partir do qual calculamos da concentração de ozônio com a Eq. (7), retornando-o a Eq. (5) para o cálculo mais preciso de  $\alpha$ , sendo este procedimento repetido até obter-se a convergência. Em seguida calculamos o valor de  $\tau_{0,5}$  com a Eq.(6), que é dependente do valor da concentração de ozônio. Deste ponto, podemos resolver a Eq.(8) fazendo um laço onde variamos o valor da concentração  $W$  de 0 a 10 cm que são seus limites de variação até obtermos um valor que mais satisfaça a Eq. (8).

## METODOLOGIA

Para estudar os processos físicos envolvidos na transmissão atmosférica da radiação solar revisamos a Lei de Beer-Lambert, a os mecanismos de espalhamento de Mie e Rayleigh e que são a base para a maioria dos modelos de transmissão atmosférica, como o SPCTRAL2 que, por sua simplicidade, permitiu-nos aplicar o método de inversão. Construímos um algoritmo baseado no exposto acima e pudemos efetivamente determinar concentrações de gases e características de partículas na atmosfera.

Para os testes de confiabilidade do algoritmo de inversão inicialmente calculamos um espectro solar usando o SPCTRAL2 e valores normalmente encontrados para os parâmetros  $\alpha$ ,  $\tau_{0,5}$ ,  $O_3$  e  $W$ . Aplicamos nesses espectros o método de inversão, para recuperar os valores de  $\alpha$ ,  $\tau_{0,5}$ ,  $O_3$  e  $W$  usados inicialmente, determinando assim o erro percentual nos valores obtidos no algoritmo de inversão.

Numa segunda fase de testes aplicamos o método de inversão nos espectros da estação *Solar Radiation Reseahch Laboratory* (EUA) encontrando os valores de  $\alpha$ ,  $\tau_{0,5}$ ,  $O_3$  e  $W$  e posteriormente utilizamos os resultados obtidos para o cálculo de um espectro direto (Eq. 3), com intuito de compararmos as curvas calculadas e medidas.

## RESULTADOS

Ao calcularmos o espectro com os valores introduzidos de  $\alpha$ ,  $\tau_{0,5}$ ,  $O_3$  e  $W$ , recuperamos estes valores na inversão com um pequeno erro para cada parâmetro:  $\Delta W = 7,042 \cdot 10^{-3}\%$ ,  $\Delta O_3 = 1,029 \cdot 10^{-1}\%$ ,  $\Delta \tau = 1,061 \cdot 10^{-4}\%$  e  $\Delta \alpha = 5,799 \cdot 10^{-4}\%$ .

No segundo teste, a partir de espectros medidos, calculamos os valores de  $\alpha$ ,  $\tau_{0.5}$ ,  $O_3$  e  $W$  através do método de inversão, cujos resultados são listados na Fig. 2 para dois dias distintos, em diferentes épocas do ano.

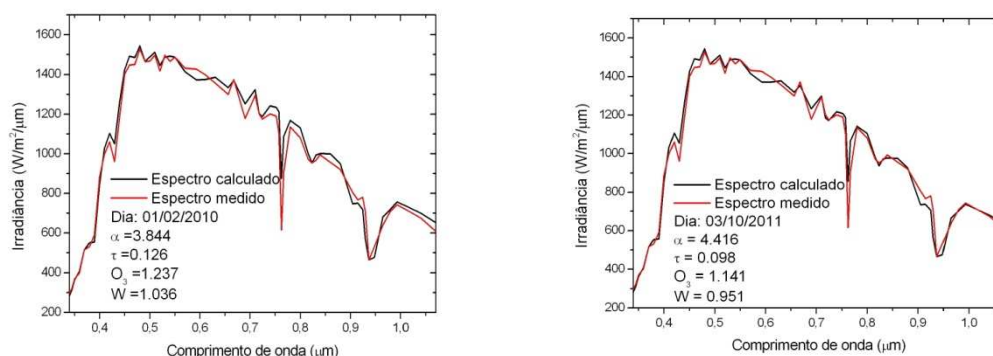


Figura 2- Espectros medidos na atmosfera terrestre e espectros calculados, com o modelo SPCTRAL2, a partir dos parâmetros obtidos da inversão do espectro medido para dois dias distintos.

A partir dos valores dos parâmetros  $\alpha$ ,  $\tau$ ,  $O_3$  e  $W$ , obtidos no processo de inversão, aplicados na Eq. 3, calculamos um espectro que é graficado juntamente com o espectro medido, mostrados na Fig. 2. Estas curvas mostram boa concordância, com exceção de algumas discrepâncias que são justificáveis pelo fato do SPCTRAL2 não ser um modelo muito preciso possuindo apenas 122 comprimentos de onda na sua configuração (BIRD & RIORDAN, 1986), necessitando de interpolação para alguns valores intermediários.

## CONCLUSÃO

Os resultados mostraram que o método de inversão aplicado pode fornecer valores bem realísticos para os parâmetros que descrevem as concentrações de gases da atmosfera opticamente ativos. Os erros observados entre os espectros medidos e calculados são originados da baixa resolução espectral do modelo SPCTRAL2. Nesta nova fase do projeto, buscaremos utilizar o método de inversão com modelos de transmissão atmosférica mais refinados, como o SMARTS2, que trazem uma melhor resolução espectral, modificando e refinando as equações e incluindo diferentes parâmetros de atenuação atmosférica (MUNNER, 2004; BADESCU, 2008; LIOU, 2002).

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BIRD, R. E.; RIORDAN, C. 1986. Simple solar spectral model for direct and diffuse irradiance on horizontal and tilted planes at the earth's surface for cloudless atmospheres. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, (25): 87-97.
- SOARES, A. E. B. A. 2010. Método de inversão para determinação de concentrações de vapor d'água, ozônio e aerossóis na atmosfera, a partir de sinais de um radiômetro de leds, em tempo real. Universidade Federal da Bahia, MSc. diss.
- BASTOS, I. T. S.; GUEDES, G. P. 2011. Estudo dos efeitos da composição atmosférica na transmissão do espectro solar. In: XV Seminário de Iniciação Científica da UEFS, Feira de Santana.
- MUNEER, T. 2004. *Solar radiation and daylight models*, Burlington, Elsevier Butterworth-Heinemann, 2a ed., 345p.
- BADESCU, V. (ed.) 2008. *Modelling Solar Radiation at the Earth Surface*. Berlin, Springer-Verlag, 517p.
- LIU, K. N. 2002. *An Introduction to Atmospheric Radiation*, International Geophysics Series, Vol. 84, London, Academic Press, 581p.