

APLICAÇÃO DO 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 CNPQ, Graduada 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. Desta forma, tal radiação é 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 se fosse uma impressão digital, compatível com a concentração de cada um dos componentes opticamente ativos das diferentes camadas atmosféricas, como ilustra a Figura 1.

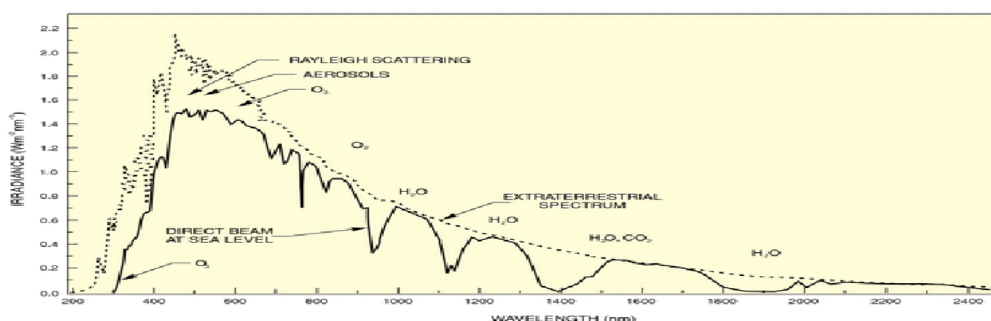


Figura 1: Comparação entre o espectro solar extraterrestre para uma atmosfera padrão ao nível do mar e um espectro de corpo negro de 6000 K. As regiões hachuradas representam as absorções moleculares na atmosfera. Fonte: <http://www.newport.com/Introduction-to-Solar-Radiation/411919/1033/content.aspx>.

Os principais espalhamentos, da radiação na atmosfera terrestre, são o Rayleigh e o 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 (LIOU, 2002).

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, já 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) (LIOU, 2002).

O espectro solar que chega a superfície terrestre (Fig. 1), resultante das possíveis interações mencionadas anteriormente, pode ser obtido utilizando um espectrômetro ou pode ser calculado através de modelos de transmissão atmosférica, como o SPCTRAL 2 (BIRD & RIODAN, 1986).

O efeito global no espectro calculado para a superfície terrestre $I_a(\lambda)$ é resultado de cada um dos processos, agindo independente e simultaneamente, de forma a criar 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.

Neste trabalho utilizamos o método de inversão proposto por Denis David (SOARES, 2010) que se baseia em inverter as equações de transmissão ótica do modelo SPCTRAL2 e calcular as concentrações de gases da atmosfera, como o vapor de água (H₂O) e ozônio (O₃), e características de aerossóis, como tamanho e turbidez.

METODOLOGIA

Estudamos inicialmente os processos físicos envolvidos na transmissão atmosférica da radiação solar, sendo estes os mecanismos de espalhamento, de Mie e Rayleigh, e as possíveis absorções. A partir disto estudamos o modelo de transmissão SPCTRAL2 e construímos algoritmo de inversão.

O modelo SPCTRAL2 traz uma expressão para o cálculo da intensidade do espectro solar, que chega a superfície terrestre, em função do comprimento de onda λ , como um aprimoramento da lei de Beer–Lambert:

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

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 λ para espalhamento Rayleigh, atenuação de aerossol, absorção por vapor d'água, absorção por ozônio e absorção por gases uniformemente misturados, respectivamente. Escrevendo a intensidade do espectro na superfície terrestre $I_d(\lambda)$ com as funções de transmitância teremos:

$$I_d(\lambda) = H_0(\lambda) \cdot D \cdot e^{\frac{M \cdot \frac{p}{p_0}}{\lambda^4 \cdot \left\{ 115,6406 - \frac{1,335}{\lambda^2} \right\}}} \cdot e^{-a_o(\lambda) \cdot O_3 \cdot M_o} \cdot e^{-\tau_{0,5} \cdot \left(\frac{\lambda}{0,5} \right)^{-\alpha} \cdot M} \cdot e^{\frac{0,2385 \cdot a_W(\lambda) \cdot W \cdot M}{(1+20,07 \cdot a_W(\lambda) \cdot W \cdot M)^{0,45}}} \cdot e^{\frac{1,41 \cdot a_u(\lambda) \cdot M \cdot p/p_0}{(1+118,93 \cdot a_u(\lambda) \cdot M \cdot p/p_0)^{0,45}}} \quad (3)$$

Onde $a_o(\lambda)$ 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), tamanho dos aerossóis (α) e a turbidez atmosférica (profundidade ótica dos aerossóis em um caminho vertical) para o comprimento de onda de $0,5 \mu m$ ($\tau_{0,5}$).

Podemos então, simplificar a equação (3) considerando que: $C_1(\lambda) = \frac{1}{M} \ln \left(\frac{H_0(\lambda) \cdot D}{I_d(\lambda)} \right) - \frac{p}{p_0} \left\{ \frac{1}{\lambda^4 \cdot \left\{ 115,6406 - \frac{1,335}{\lambda^2} \right\}} + \frac{1,41 \cdot a_u(\lambda)}{(1+118,93 \cdot a_u(\lambda) \cdot M \cdot \frac{p}{p_0})^{0,45}} \right\}$, $C_2(\lambda) = a_o(\lambda) \cdot \frac{M_o}{M}$, $C_3(\lambda) = 0,2385 \cdot a_W(\lambda)$ e $C_4(\lambda) = 20,07 \cdot a_W(\lambda)$, constantes. Desta forma escrevemos:

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

Analisando a Eq.(4) podemos perceber que, de acordo com a escolha do coeficiente de absorção por comprimento de onda teremos uma simplificação da mesma, pois alguns termos serão anulados. Escolhemos os comprimentos de onda mostrados na Tabela 1:

Tabela 1- Os comprimentos de onda (λ) e os coeficientes de absorção da água, ozônio e gases uniformemente misturados, $a_W(\lambda)$, $a_o(\lambda)$ e $a_u(\lambda)$, respectivamente, utilizados no método de inversão.

i	$\lambda(\mu\text{m})$	$a_w(\lambda)$	$a_o(\lambda)$	$a_u(\lambda)$
11	0,430	0,000	0,000	0,000
22	0,540	0,000	0,075	0,000
26	0,610	0,000	0,012	0,000
51	0,937	55,000	0,000	0,000

Legenda: i é o índice do comprimento de onda ($i=1...57$).

Utilizando a Tabela 1 montamos quatro equações e manipulamos de forma que obtivemos o sistema abaixo:

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

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

$$O_3 = \frac{C_1(\lambda_3) - \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_2}\right)^{-\alpha} \cdot C_1(\lambda_2)}{C_2(\lambda_3) - \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_2}\right)^{-\alpha} \cdot C_2(\lambda_2)} \quad (7)$$

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

Para o cálculo do algoritmo de inversão iniciamos com a Eq. (5), nesta consideramos a concentração de ozônio nula e assim calculamos o valor aproximado de α , dado o valor aproximado calculamos o valor de O_3 , com a Eq. (7), e retornamos a Eq. (5) para o cálculo mais preciso de α . O procedimento é repetido até obter-se a convergência, daí calculamos então o valor de $\tau_{0,5}$, com a Eq.(6). Resolvemos a Eq.(8) fazendo um laço onde variamos o valor da concentração W de 0 até 10 cm (que é o valor máximo), até obtermos uma solução que mais satisfaça a Eq. (8).

Para os testes de confiabilidade do algoritmo de inversão calculamos um espectro solar, usando a Eq. (3) e valores teóricos para os parâmetros α , $\tau_{0,5}$, O_3 e W , em seguida aplicamos no espectro calculado o método de inversão, para recuperar os valores de α , $\tau_{0,5}$, O_3 e W utilizados inicialmente. Por fim, encontramos o erro percentual entre o valor utilizado inicialmente e o recuperado no algoritmo de inversão.

Em uma segunda fase de testes aplicamos o método de inversão nos espectros solares fornecidos pelo *Solar Radiation Research Laboratory* do *National Renewable Energy Laboratory – NREL* (latitude de 39,742°N e altitude 1828,8 m) encontrando os valores de α , $\tau_{0,5}$, O_3 e W e posteriormente utilizamos estes resultados para o cálculo de um espectro direto (Eq. 3). Calculamos ainda, o erro percentual entre as curvas calculadas e medidas.

RESULTADOS

Calculamos um espectro, utilizando valores teóricos para α , $\tau_{0,5}$, O_3 e W , posteriormente utilizamos o mesmo na inversão para recuperar os valores de α , $\tau_{0,5}$, O_3 e W . O erro percentual entre o valor utilizado inicialmente e o recuperado no algoritmo de inversão são mostrados na Tabela 2.

Tabela 2 – Erros encontrados no cálculo de α , $\tau_{(0,5)}$, O_3 e W , com o espectro calculado com o conhecimento prévio desses valores.

Parâmetros de entrada		Desvio % Grupo 1	Desvio % Grupo 2	Desvio % Grupo 3
α	1,300	0,0001507	0,0006929	0,0001860
$\tau_{0,5}$	0,084	0,0000656	0,0002303	0,0000570

O_3	0,340 atm-cm	0,1020000	0,1034293	0.1022552
W	1,420 cm	0,0000000	0,0070429	0,0000000

No segundo teste a partir de espectros medidos, calculamos os valores de α , $\tau_{0,5}$, O_3 e W , com o método de inversão. E para verificar a qualidade dos resultados, inserimos os parâmetros encontrados e calculamos um espectro, com a Eq. (3). Isto para compará-lo com os espectros medidos e calcularmos o erro percentual. Na Figura 2 para mostramos os resultados para dois dias distintos, em diferentes épocas do ano.

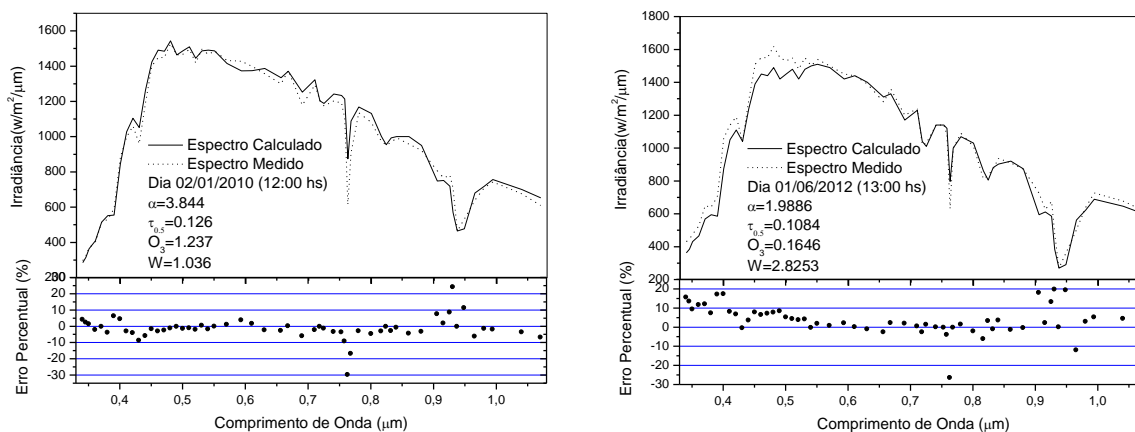


Figura 2- Espectros medidos na atmosfera terrestre e espectros calculados, com o modelo SPCTRAL2, a partir dos parâmetros obtidos da inversão do espectro medido para dois dias distintos.

As curvas mostradas na Figura 2 apresentam alguns erros, pelo fato de o SPCTRAL2 não ser um modelo muito preciso, possuindo apenas 122 comprimentos de onda na sua configuração (BIRD & RIORDAN, 1986). Ainda foi necessário fazer interpolações nas intensidades do espectro medido para que os valores dos comprimentos coincidam com os do modelo.

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.

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.
- LIU, K. N. 2002. *An Introduction to Atmospheric Radiation*, International Geophysics Series, Vol. 84, London, Academic Press, 581p.