

STEFFANY RINCON PETERS

**ESTUDO DA APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE INVERSÃO E DE
REDES NEURAS ARTIFICIAIS NO MONITORAMENTO DE
AEROSSÓIS POR LIDAR**

São Paulo
2020

STEFFANY RINCON PETERS

ESTUDO DA APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE INVERSÃO E DE REDES
NEURAS ARTIFICIAIS NO MONITORAMENTO DE AEROSSÓIS POR
LIDAR

Versão Corrigida

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção do título
de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. Roberto Guardani

Coorientador: Prof. Dr. Fábio Juliano S. Lopes

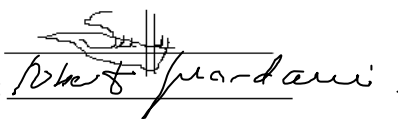
São Paulo
2020

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

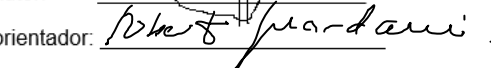
Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 26 de Outubro de 2020.

Assinatura do autor:



Assinatura do orientador:



Catlogação-na-publicação

Peters, Steffany Rincon

ESTUDO DA APLICAÇÃO DE TÉCNICAS DE INVERSÃO E DE REDES NEURAS ARTIFICIAIS NO MONITORAMENTO DE AEROSSÓIS POR LIDAR / S. R. Peters -- versão corr. -- São Paulo, 2020. 141 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.

1.Aerossóis 2.Algoritmo de inversão 3.Redes Neurais Artificiais 4.Sensoriamento Remoto 5.Lidar I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

Dedico a todos que acreditam na ciência e que a
usam em prol do meio ambiente.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, a Deus pela minha vida e por trilhar meu caminho, colocando nele grandes oportunidades de crescimentos profissional e pessoal. Agradeço ainda, por uma família e amigos incríveis.

Agradeço ao meu orientador Dr. Roberto Guardani, por toda a paciência, incentivos e ensinamentos. Dando sempre sugestões para a realização e melhoramento deste trabalho. Além disso, por todos os almoços e cafés que sempre me proporcionaram momentos de descontração e, por toda amizade e carinho com que trata os membros de sua equipe e trabalho.

Ao meu coorientador Dr. Fábio Lopes, que desde o primeiro momento em que nos conhecemos, sempre se preocupou em me ajudar, se tornando um grande amigo. Agradeço por estar sempre disponível em tirar todas as minhas dúvidas (não importando o dia e a hora), por todos os incentivos, preocupações e ensinamentos, que se tornaram valiosos para a realização deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Eduardo Landulfo por me receber em seu laboratório e permitir também fazer parte de sua equipe. Além disso, por ter compartilhado informações essenciais para elaboração do trabalho. E a sua equipe, em especial ao Yoshida, Jonatan e Gregori.

A todos os professores do programa de pós-graduação do Departamento de Engenharia Química da Poli – USP em especial os professores Dr. José Luís de Paiva e Dr. Antônio Carlos Teixeira pela atenção e carinho comigo e com meus colegas de equipe.

Aos meus amados pais, João Paulo e Maria Del Pilar por todo amor, carinho e dedicação na minha criação. Por sempre estarem presentes na minha vida, me ensinarem a grande importância em que os estudos trazem em nossas vidas e por me proporcionarem todas as condições necessárias para que eu chegasse até aqui. Agradeço também ao meu irmão e minha avó Elza por estarem sempre ao meu lado e me apoiarem.

A Gilberto, per essere vicino a me e poter condividere tutti i momenti, buoni o cattivi. E per avermi sempre incoraggiato in tutte le scelte che faccio, per tutta la pazienza durante quei periodi in cui eravamo fisicamente lontani, per le risate, i consigli ed amor.

Aos meus colegas de equipe e amados amigos Zerwas, Patrícia, Renata (Rinara) e Fabia (que me abrigou com todo carinho em sua casa), por todos os momentos em que passamos juntos e que foram/são de extrema importância. Agradeço por todas as risadas, cafés, pastéis, almoços, amizade e companheirismo.

Aos meus queridos amigos Felipe, Rômulo, Carol e Laís que sempre estiveram presentes, por todas as conversas, risadas, apoio e essencialmente amizade.

As minhas amigas e irmãs de coração Pri Palharim, Pri Baruffi, Cibele (Bebel) e Thais, por sempre me incentivarem e serem exemplos para mim (mesmo com a distância física).

A todos amigos em que fiz durante o percurso desse metrado, em especial Rafael (por todas as conversas, ideias e ajudas), Fernando (nosso querido FHC), Gustavo Galo, Maria Clara, Maria Giuliana, Jéssica, Lélia e Buritti.

A todos os funcionários do PQI, em especial a Regina e Carminha, pelo carinho e conversas.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoas de Nível Superior (CAPES) e Research Centre for Gas Innovation (RCGI) pela concessão de bolsas durante o curso de metrado.

*"Imparare non stanca mai la mente, non rende
timorosi e non crea rimpianti"*

*“Aprender nunca cansa a mente, não te deixa com
medo e não cria arrependimentos”*

(Leonardo da Vinci)

RESUMO

A concentração elevada de partículas de aerossóis pode intensificar significativamente as mudanças climáticas globais. Estudos com técnicas de sensoriamento remoto como o sistema lidar (“Light Detection and Ranging”) têm se mostrado eficientes na coleta de informações importantes sobre as partículas de aerossóis presentes na atmosfera, devido à alta resolução espacial e temporal, bem como o monitoramento em tempo real. A partir do sinal de luz retroespalhada do lidar, objetivou-se obter a distribuição da concentração de partículas de aerossóis presentes na atmosfera segundo seu tamanho. No entanto, essas informações geradas apresentam problemas de inversão, dificultando a obtenção de soluções. No presente estudo foram comparadas duas técnicas de inversão com regularização (de Phillips-Twomey - RPT e o de Veselovskii – VSK) com dois algoritmos alternativos, desenvolvidos neste estudo para estimar a concentração de partículas de aerossóis (DTA) segundo seu tamanho a partir de dados experimentais de um sistema lidar: busca direta de parâmetros por otimização (BDO) e um modelo com Rede Neural Artificial (RNA). Os resultados foram comparados com informações de concentrações volumétricas de partículas de aerossóis disponíveis na rede AERONET, e mostraram que o método BDO apresentou a melhor estimativa das distribuições de concentração das partículas (apresentando valores próximos de raio médio, desvio padrão e concentração de partículas para dois estudos de casos). O modelo em Redes Neurais Artificiais apresentou ajuste relativamente bom aos dados experimentais (R^2 entre de 0,72 a 0,82) para o conjunto de treinamento da rede e valores um pouco inferiores (R^2 0,64 a 0,92) para o conjunto de validação do modelo (conjunto de teste). O estudo mostrou que os métodos de busca direta (BDO) e Redes Neurais Artificiais (RNA) representam aplicações mais eficientes para avaliar a distribuição das partículas de aerossóis na atmosfera a partir dos dados medidos pelo sistema lidar.

Palavras chaves: Aerossóis. Algoritmos de inversão. Redes Neurais Artificiais. Sensoriamento remoto. Lidar.

ABSTRACT

The high concentration of aerosol particles in the atmosphere can significantly intensify global climate change. Studies with remote sensing techniques such as the Lidar system (“Light Detection and Ranging”) have shown to be efficient in collecting important information about aerosol particles present in the atmosphere, due to the high spatial and temporal resolution, as well as the real-time monitoring ability. This study aimed at evaluating data processing techniques for estimating aerosol concentration in the atmosphere according to particle size, based on the backscattered light signal provided by a Lidar system. Two inversion-with-regularization techniques (Phillips-Twomey - RPT and Veselovskii - VSK) were compared with two alternative algorithms developed in this study: direct parameter search by optimization (BDO) and an Artificial Neural Network (ANN) model. The results were compared with information on volumetric concentrations of aerosol particles provided by the AERONET network. The BDO method resulted in the best estimate of the particle concentration distributions (in terms of mean size, standard deviation and particle concentration for two case studies). The model Artificial Neural Network model presented a relatively good adjustment to the experimental data (R^2 between 0.72 and 0.82) for the network training set and slightly lower values (R^2 0.64 to 0.92) for the model validation (test set). The study showed that the direct search method (BDO) and the Artificial Neural Network model (RNA) are efficient alternatives to the inversion methods to evaluate the distribution of aerosol particles in the atmosphere from the data measured by the Lidar system.

Key words: Aerosols. Inversion algorithm. Artificial neural networks. Remote sensing. Lidar.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Ilustração da configuração básica de um sistema lidar coaxial.....	20
Figura 2: Possíveis configurações do sistema lidar.....	21
Figura 3 - Informações extraídas da interação luz e partícula.....	23
Figura 4 - Características das partículas de aerossol atmosférico de acordo com seu tamanho	28
Figura 5 - Geometria do lidar.....	29
Figura 6: Perfil de retroespalhamento em relação à distância para $\lambda = 532 \text{ nm}$	32
Figura 7: Sistema de posições de medição de um fotômetro fixado em solo que capta a	36
Figura 8 - Esquema da transmissão de dados da rede AERONET.....	37
Figura 9: Mecanismos de interação da luz com uma partícula.....	40
Figura 10 – Exemplo de uma estrutura de Rede Neural Artificial.....	52
Figura 11 – Modelo não-linear de uma Rede Neural Artificial.. ..	53
Figura 12 - Exemplos de funções de ativação.....	54
Figura 13 - Fluxograma das etapas executadas no presente trabalho.....	55
Figura 14 - (a) Sistema lidar utilizado. (b) Luzes incidentes de dois sistemas de lidar.	56
Figura 15- Fluxograma da pré-processamento dos dados experimentais do lidar. ...	57
Figura 16: Fluxograma da etapa do pré-processamento dos dados experimentais do lidar.	58
Figura 17- Fluxograma das etapas da obtenção dos coeficientes ópticos por inversão Raman.....	59
Figura 18 - Algoritmo da técnica de Regularização Phillips-Twomey.....	65
Figura 19- Algoritmo da técnica de Regularização Veselovskii.....	68
Figura 20 – Fluxograma do algoritmo de Busca direta por otimização de parâmetros.	71
Figura 21 - Fluxograma do método de validação dos algoritmos para estimar a DTA.	73
Figura 22 - Perfil do sinal corrigido do canal 387 nm do sistema lidar em relação à altura.	76
Figura 23 – Distribuições de tamanho de aerossol de três grandes metrópoles mundiais.....	77

Figura 24 - Fluxograma da aplicação da técnica de Redes Neurais Artificiais para a validação dos dados experimentais do sistema lidar.	77
Figura 25 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de RPT - Caso 1.....	79
Figura 26 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de VSK - Caso 1.....	80
Figura 27 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de BDO - Caso 1.....	82
Figura 28 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de RPT - Caso 2.....	83
Figura 29 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de VSK - Caso 2.....	85
Figura 30 – Comparação entre a DT original e a estimada pelo método de BDO- Caso 2.	86
Figura 31 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de RPT - Caso 3.....	88
Figura 32 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de VSK - Caso 3.....	89
Figura 33 - Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de BDO- Caso 3.....	90
Figura 34 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de RPT - Caso 4.....	91
Figura 35 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de VSK - Caso 4.....	92
Figura 36 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de BDO- Caso 4.....	94
Figura 37 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de RPT - Caso 5.....	95
Figura 38 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de VSK - Caso 5.....	96
Figura 39 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de BDO- Caso 5.....	98
Figura 40 – Comparação da DTA original e a estimada pelo método de RPT sem erros randômicos adicionados nos coeficientes ópticos.....	99

Figura 41 – Comparação da DTA_{Orig} com as DTAs com erros randômicos adicionados nos coeficientes ópticos – RPT.	100
Figura 42 – Resultados das DTAs com adição de erros randômicos em cada coeficiente óptico – Algoritmo RPT.	101
Figura 43 – Comparação entre DTA original e a estimada pelo método de VSK sem erros randômicos adicionados aos coeficientes ópticos.....	102
Figura 44 – Comparação da DTA_{Orig} com as DTAs com erros randômicos adicionados aos coeficientes ópticos – VSK..	103
Figura 45 – Resultados das $DTAs_{VSK}$ quando adicionando erros randômicos em cada coeficiente óptico - VSK.	104
Figura 46 – Comparação entre DTAs original e a estimada pelo método de BDO sem erros randômicos adicionados aos coeficientes ópticos.....	105
Figura 47 – Comparação da DTA_{Orig} com as DTAs com erros randômicos adicionados aos coeficientes ópticos - BDO.	106
Figura 48 – Resultados das $DTAs_{BDO}$ quando adicionados erros randômicos em cada coeficiente óptico - BDO.....	107
Figura 49 – Índice de refração complexo em relação aos comprimentos de ondas medidos pelo fotômetro solar da rede AERONET para o dia 28/Mai/2018 às 17:06 UTC.....	108
Figura 50 – Sinal corrigido do lidar para o dia 28 de maio de 2018 - Quick-look λ_{532nm}	109
Figura 51 – Distribuição de aerossóis na cidade de São Paulo no dia 28 de maio de 2018 às 17:06 – AERONET..	110
Figura 52 - Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de RPT – 28/05/18 as 17:06 UTC..	110
Figura 53 - Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de RPT – 28/05/18 às 17:06 UTC.	111
Figura 54 - Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de BDO – 28/05/18 às 17:06 UTC.....	112
Figura 55 – Índice de refração complexo em relação aos comprimentos de ondas medidos pelo fotômetro solar da rede AERONET para o dia 25/Jun/2018 às 18:11 UTC.....	113
Figura 56 – Sinal corrigido do Lidar em relação a altura no dia 25 de junho de 2018 - Quick-look λ_{532nm}	113

Figura 57 - Distribuição de aerossóis da cidade de São Paulo no dia 25 de junho de 2018 às 18:11 – AERONET.	114
Figura 58 – Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de RPT – 25/06/18 às 18:11 UTC..	115
Figura 59 – Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de VSK– 25/06/18.	116
Figura 60 - Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de DBO – 25/06/18 às 18:11 UTC.....	117
Figura 61 - Comparações entre valores experimentais e calculados pela RNA para o conjunto de aprendizado.	118
Figura 62 - Comparações entre valores experimentais e calculados pela RNA para o conjunto de testes.	119
Figura 63 – Comparação entre a DTA da rede AERONET e a DTA gerada com os valores calculados pela rede neural para o conjunto de testes.....	120

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Alguns trabalhos desenvolvidos com os dados ópticos de sistemas lidar	25
Tabela 3 - Coeficientes de retroespalhamento e extinção estudados	60
Tabela 4 – Trabalhos que usaram o método de validação cruzada generalizada ...	64
Tabela 5 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 1 – Validação RPT	80
Tabela 6 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 1 – Validação VSK	81
Tabela 7 – Valores da <i>F_{min}</i> e dos coeficientes ópticos do caso 1 – Validação BDO.	82
Tabela 8 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 2 – Validação RPT	84
Tabela 9 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 2 – Validação VSK	85
Tabela 10 – Valores da <i>F_{min}</i> e dos coeficientes ópticos do caso 2 – Validação BDO.	87
Tabela 11 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 3 – Validação RPT	88
Tabela 12– Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 3 – Validação VSK	89
Tabela 13 – Valores da <i>F_{min}</i> e dos coeficientes ópticos do caso 3 – Validação BDO.	90
Tabela 14 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 4 – Validação RPT	92
Tabela 15 - Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 4 – Validação VSK	93
Tabela 16 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 4 – Validação BDO	94
Tabela 17 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 5 – Validação RPT	96
Tabela 18 - Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 5 – Validação VSK	97

Tabela 19 - Valores da <i>Fmin</i> e dos coeficientes ópticos do caso 5 – Validação BDO	98
Tabela 20 – Valores da diferença quadrática e erro percentual relativo sem adição de erros randômicos -RPT	100
Tabela 21 – Valores da diferença quadrática e erro percentual sem adição de erros randômicos -VSK	102
Tabela 22 - Valores da <i>Fmin</i> e dos coeficientes ópticos sem adição de erros randômicos - BDO.....	105

LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIações

AERONET	Aerosol Robotic Network	
A	Matriz óptica	
a	Parâmetro adimensional de tamanho	
aer	Aerossol	
a _k	Coefficiente Mie	
a _t	Concentração da área superficial total	μm ² m ⁻³
B	Função B-spline	
b _k	Coefficiente Mie	
c	Velocidade da luz no vácuo	m/s
d _a	Diâmetro aerodinâmico da partícula	μm
DTA	Distribuição volumétrica de tamanho de aerossol	μm ³ m ⁻³
EARLINET	European Aerosol Research LIDAR Network	
e _{num}	Erro numérico	
e _{exp}	Erro experimental	
GVC	Validação cruzada generalizada	
H	Matriz de regularização	
I _o	Intensidade de luz incidente	
I _c	Intensidade captada	
I _s	Intensidade total	
K	Função de Kernel	
LALINET	Latin American LIDAR Network	
L _{aer}	Razão Lidar de aerossóis	

L_{mol}	Razão Lidar de moléculas	
m	Índice de refração complexo	
mol	Molecular	
N	Concentração numérica de partículas	m^{-3}
$n(r)$	Distribuição numérica de partículas	$m^{-3}\mu m^{-1}$
P	Potência da radiação recebida	mJ
P_{GVC}	Parâmetro da validação cruzada generalizada	
Q_{esp}	Eficiência de retroespalhamento	
Q_{ext}	Eficiência de extinção	
r	Raio da partícula	μm
t	Tempo	ns
T	Transmitância	
v	Concentração volumétrica	μm^3m^{-3}
v_t	Concentração volumétrica total	μm^3m^{-3}
V	Volume	μm^3
w	Vetor peso	
z	Altura	m

Letras Gregas

α	Coeficiente de extinção	m^{-1}
α_{ab}	Coeficiente de absorção	m^{-1}
α_{ext}	Coeficiente de extinção	m^{-1}
β	Coeficiente de retroespalhamento	$m^{-1}sr^{-1}$
γ	Multiplicador de Lagrange	

ζ	Função Riccati- Bessel	
λ	Comprimento de onda	nm
μ	Raio médio	μm
σ_a	Seção transversal	m^2
σ	Desvio padrão	μm
τ	Taxa de repetição	Hz
ψ	Função Riccati- Bessel	
ω	Ângulo sólido	sr

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	16
2. OBJETIVOS	18
2.1. OBJETIVO GERAL.....	18
2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	18
3. MOTIVAÇÃO DO TRABALHO	19
4. INTRODUÇÃO AOS FUNDAMENTOS DO SISTEMA ESTUDADO.....	20
4.1. SENSORIAMENTO REMOTO POR LIDAR (“LIGHT DETECTION AND RANGING”)	20
4.2. SISTEMAS INVERSOS.....	22
5. REVISÃO DA LITERATURA.....	24
6. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	26
6.1. AEROSSÓIS ATMOSFÉRICOS.....	26
6.2. <i>Equacionamento Fundamental do Lidar</i>	28
6.2.1. <i>Tratamento do sinal de retroespalhamento e testes instrumentais do lidar</i> 34	
6.3. REDE AEROSOL ROBOTIC NETWORK - AERONET	35
6.4. INTERAÇÃO LUZ-AEROSSOL.....	39
6.5. OBTENÇÃO DOS COEFICIENTES ÓPTICOS DAS PARTÍCULAS ATMOSFÉRICAS: SISTEMA LIDAR	41
6.5.1. <i>Lidar elástico</i>	42
6.5.2. <i>Lidar Raman</i>	44
6.6. EQUACIONAMENTO PARA ESTIMATIVA DA DISTRIBUIÇÃO DE TAMANHO DE AEROSSÓIS (DTA)	48
6.7. REDES NEURAS ARTIFICIAIS.....	51
7. METODOLOGIA.....	55
7.1. AQUISIÇÃO E CORREÇÃO DOS DADOS DO SISTEMA LIDAR.....	55
7.2. MÉTODO DE INVERSÃO KLETT-FERNALD-SASANO: DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE RETROESPALHAMENTO DO CANAL 1064 NM.....	57
7.3. MÉTODO DE INVERSÃO RAMAN: DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE RETROESPALHAMENTO E EXTINÇÃO DOS CANAIS 355 E 532 NM.....	59

7.4.	APLICAÇÃO DAS TÉCNICAS DE INVERSÃO – RECUPERAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO VOLUMÉTRICA DE TAMANHO DE AEROSSOL	60
7.4.1.	<i>TÉCNICA DE INVERSÃO - REGULARIZAÇÃO DE PHILLIPS -TWOMEY (RPT)</i>	61
7.4.2.	<i>TÉCNICA DE INVERSÃO - REGULARIZAÇÃO DE VESELOVSKII - VSK</i>	65
7.4.3.	<i>MÉTODO DIRETO – BUSCA DIRETA POR OTIMIZAÇÃO DE PARÂMETRO - BDO</i> ..	69
7.5.	CRITÉRIOS DE VALIDAÇÃO DOS ALGORITMOS DOS MÉTODOS DE INVERSÃO	71
7.5.1.	<i>Validação com dados simulados</i>	71
7.6.	APLICAÇÃO DOS COEFICIENTES ÓPTICOS EXPERIMENTAIS DO SISTEMA LIDAR – ALGORITMOS DE INVERSÃO	73
7.7.	APLICAÇÃO DA TÉCNICA DE REDES NEURAS ARTIFICIAIS	74
8.	ANÁLISE DOS RESULTADOS.....	78
8.2.	VALIDAÇÃO DOS ALGORITMOS - ESTIMAR A DISTRIBUIÇÃO VOLUMÉTRICA DE TAMANHO DE AEROSSOL (DTA)	78
8.2.1.	<i>Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 1</i>	78
8.2.2.	<i>Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 2</i>	83
8.2.3.	<i>Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 3</i>	87
8.2.4.	<i>Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 4</i>	91
8.2.5.	<i>Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 5</i>	95
8.3.	SENSIBILIDADE DOS ALGORITMOS – ADIÇÃO DE ERROS RANDÔMICOS	99
8.4.	APLICAÇÃO DOS ALGORITMOS DE INVERSÃO A DADOS EXPERIMENTAIS DO LIDAR	107
8.4.1.	<i>Estudo de Caso 1: 28 de maio de 2018</i>	108
8.4.2.	<i>Estudo de Caso 2: 25 de junho de 2018</i>	112
8.5.	APLICAÇÃO DE REDES NEURAS ARTIFICIAIS NO PROCESSAMENTO SINAIS PRIMÁRIOS DO LIDAR	117
11.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	125
	APÊNDICE A - EQUACIONAMENTO DA TEORIA DE MIE	134

1. INTRODUÇÃO

Atmosfera terrestre é normalmente definida como uma camada gasosa fina que envolve toda a extensão da Terra, composta por: 78 % de nitrogênio (N_2), 21 % e o oxigênio (O_2), além de outros gases que têm suas concentrações variadas, como o metano (CH_4), dióxido de carbono (CO_2) e o vapor de água ($H_2O_{(g)}$) (SINGH, 1994). Além de gases, estão presentes na atmosfera terrestre nuvens e partículas de aerossóis, os quais exercem uma importante função no clima da Terra (COSTA et al., 2014). Contudo, devido as atividades humanas a concentração de aerossóis na atmosfera aumentou a partir da evolução industrial em algumas regiões do mundo (NASA, 2009). E a alta concentração das partículas de aerossóis na atmosfera pode intensificar as mudanças climáticas, pelo fato de ter a capacidade de alterar o balanço radioativo do planeta (COSTA et al., 2014). Com isso, grandes metrópoles, como São Paulo, são afetadas diariamente pela poluição atmosférica causada principalmente por aerossóis oriundos de emissões veiculares e outras fontes (CETESB, 2018). Além do impacto ambiental, os aerossóis também são prejudiciais à saúde humana, e seus efeitos podem variar de acordo com sua origem química e dimensões (RIBEIRO e ASSUNÇÃO, 2002). Neste sentido, torna-se necessário o monitoramento de aerossóis.

A técnica de sensoriamento remoto se baseia-se na observação e coleta de informações de um alvo (objeto, área ou fenômeno) sem ser necessário o contato físico com o mesmo (SOUZA, 2010). As informações do alvo podem ser coletadas a partir da interação do alvo com a radiação eletromagnética, dependendo do tipo de sistema utilizado, essa radiação pode ser através de uma fonte natural (como o Sol) – denominado sistema de sensoriamento remoto passivo – ou por fontes artificiais (como pulsos eletromagnéticos emitidos por um laser) – denominado sistema de sensoriamento remoto ativo (SOUZA, 2010). Como exemplo desses dois tipos de técnicas de sensoriamento remoto, tem-se o fotômetro solar (passivo) e os sistemas de radar e lidar (ativos).

O sistema lidar (“Light Detection and Ranging”) tem se mostrado eficiente para coletar informações importantes em estudos de partículas de aerossóis (CHUDZYNSKI et al., 2001). Esse sistema possui alta resolução espacial e temporal, sendo possível observar a atmosfera sem interferência direta e em tempo real (LIMA

et al., 2003). O sistema lidar, se baseia no mesmo conceito do radar, com emissão de pulsos de radiação eletromagnética e análise do sinal de retorno. A partir do sinal de retorno do lidar, vários produtos de propriedades ópticas e físicas da atmosfera podem ser obtidos, entre eles estão dois mais importantes, os coeficientes de extinção e de retroespalhamento, $\alpha(z, \lambda)$ e $\beta(z, \lambda)$, respectivamente (LUDWIG, 2014). Esses dois coeficientes ópticos contêm informações sobre o tipo de moléculas e/ou partículas que interagem com a luz incidente do laser do sistema lidar e estão relacionados com a concentração de aerossóis presentes na atmosfera (PARAMESWARAN et al., 1991; BÖCKMANN e WAUER, 2001). Contudo, ao usar esses coeficientes para determinar, por exemplo, a distribuição de tamanho de partículas de aerossóis, é necessário resolver um “problema inverso”. Segundo Velho (2008), problemas inversos são denominados de problemas mal postos, para os quais há uma dificuldade de se obter solução por meio analítico.

Assim, se faz necessário aplicar técnicas adequadas à solução de problemas mal postos, para estimar as propriedades ópticas e físicas de aerossóis. Dentre as técnicas mais estudadas, estão os métodos da regularização, que consistem na determinação da solução aproximada utilizando meios de “suavização” (MÜLLER et al. 1999; VESELOVSKII et al., 2002; BÖCKMANN et al., 2005).

No presente estudo, essas técnicas de inversão por regularização foram comparadas a uma técnica de reconhecimento de padrões, baseada em redes neurais artificiais (RNA's). Geralmente, as técnicas de RNA's são empregadas para simular processos não lineares complexos, nos quais é difícil obter um modelo fenomenológico. Por exemplo, em física atmosférica são usadas para previsões climáticas (NEVES e BRISTOT, 2004; GUIMARÃES et al., 2009; ANOCHI, 2015).

Neste contexto, este estudo objetivou comparar estimativas de propriedades de aerossóis atmosféricos obtidos por técnicas de inversão com estimativas obtidas por um modelo de RNA a partir de dados experimentais do lidar, a fim de estimar a concentração volumétrica por tamanho de partículas de aerossóis na atmosfera.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo Geral

O objetivo geral deste estudo foi comparar estimativas de propriedades de aerossóis atmosféricos obtidos por técnicas de inversão e uma técnica de busca direta com estimativas obtidas por um modelo de RNA a partir de dados experimentais de um sistema lidar, a fim de calcular a concentração volumétrica por tamanho de partículas de aerossóis na atmosfera.

2.2. Objetivos Específicos

- ✓ Utilizar os algoritmos de inversão para obter as propriedades ópticas de aerossóis medidos pelo sistema lidar na atmosfera de São Paulo.
- ✓ Desenvolver dois algoritmos de inversão e um a partir do método de Busca Direta por Otimização para estimar a distribuição volumétrica de concentração por tamanho de aerossóis atmosféricos usando os coeficientes ópticos do lidar;
- ✓ Aplicar um software da técnica de RNA para a associação do sinal corrigido do sistema lidar com dados do fotômetro solar da rede AERONET e obter a distribuição volumétrica de concentração por tamanho de aerossóis atmosféricos;
- ✓ Validar os algoritmos desenvolvidos com distribuição volumétrica de concentração por tamanho simuladas a partir de parâmetros conhecidos;
- ✓ Comparar as distribuições de concentração por tamanho de aerossóis atmosféricos obtidas neste estudo com as disponíveis na rede AERONET, de modo a avaliar as possibilidades de aplicação de cada técnica no monitoramento de aerossóis atmosféricos.

3. MOTIVAÇÃO DO TRABALHO

A aquisição e análise de dados ópticos dos aerossóis atmosféricos são de grande importância para estudos da influência dos aerossóis nos processos de mudanças climáticas do planeta. Em virtude de suas propriedades ópticas, as partículas de aerossóis podem alterar o balanço radiativo e as propriedades microfísicas de nuvens (COSTA et al., 2014). Além disso, como os aerossóis presentes na troposfera¹ afetam a saúde pública, seu monitoramento representa um recurso essencial para fins de controle de emissões. Com a técnica lidar é possível detectar em tempo real e com uma grande resolução espacial, características ópticas dos aerossóis a partir da interação da luz emitida pelo sistema lidar com os componentes da atmosfera, cobrindo distâncias verticais na atmosfera da ordem de metros até centenas de quilômetros (WANDINGER, 2005).

Com os resultados obtidos pelo presente trabalho pretende-se comparar técnicas para estimar a distribuição volumétrica de tamanho de aerossóis a partir dos dados ópticos experimentais obtidos pelo sistema de lidar, de modo a contribuir para o desenvolvimento dessa tecnologia e aumentar a confiabilidade da técnica quanto a sua aplicação no monitoramento de emissões atmosféricas de partículas de aerossóis.

¹ A troposfera é a camada mais baixa da atmosfera terrestre, com cerca de 8 a 15 km de altura (NASA, 2007).

4. INTRODUÇÃO AOS FUNDAMENTOS DO SISTEMA ESTUDADO

4.1. Sensoriamento Remoto por Lidar (“Light Detection and Ranging”)

A técnica de lidar (“Light Detection and Ranging”) baseia-se no mesmo conceito de sistemas de radar, com emissão de pulsos de radiação eletromagnética e análise do sinal de retorno. A configuração básica de um sistema lidar pode ser dividida em: transmissor, receptor e detector, como apresentado na Figura 1.

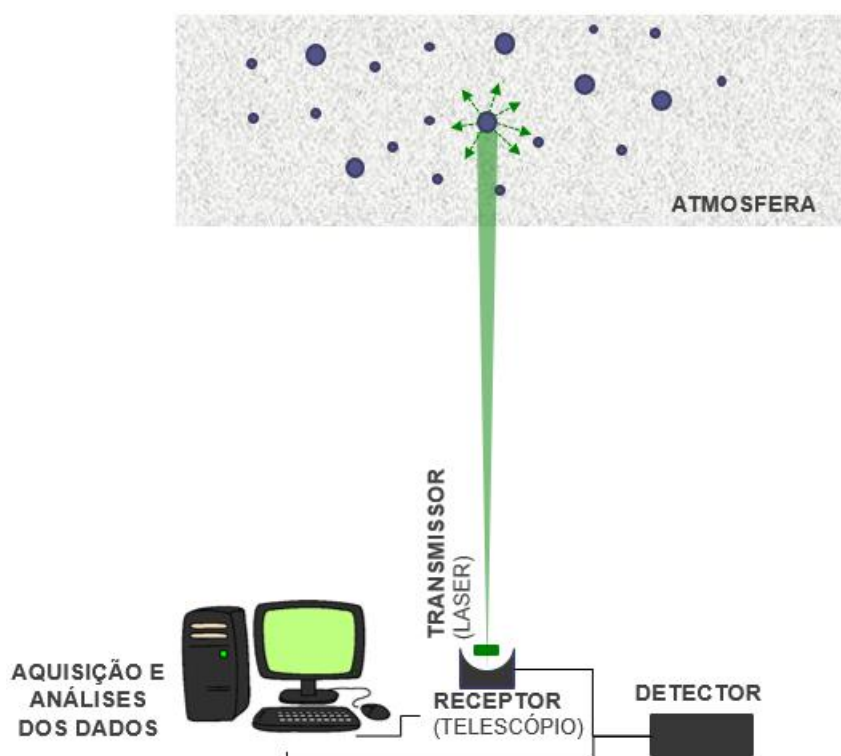


Figura 1 – Ilustração da configuração básica de um sistema lidar coaxial Fonte: Própria autoria, 2020.

No caso do lidar, porém, utiliza-se uma fonte própria de radiação eletromagnética, cujos comprimentos de onda abrangem a faixa do ultravioleta até o infravermelho próximo (COSTA e LANDULFO, 2014). O lidar possui alta resolução espacial e temporal, além de permitir observar a atmosfera em diferentes pontos, em tempo real e sem interferência direta (COSTA e LANDULFO, 2014). Devido a essas

características, tem se mostrado uma ferramenta eficaz na coleta de informações que auxiliam em estudos mais aprofundados da atmosfera.

No lidar, o transmissor é composto por um laser que emite pulsos de luz (radiação incidente) em direção à atmosfera. Esses pulsos de luz interagem com os componentes no meio (por exemplo, partículas e/ou moléculas). Nessa interação, a luz é espalhada e/ou absorvida (ARGALL et al., 2002).

Uma parte dessa luz espalhada no meio retorna ao sistema (fótons retroespalhados) e é medida por um receptor. O receptor, por sua vez, consiste de um telescópio que coleta os fótons retroespalhados e os direciona para um fotodetector (fotossensores). O detector converte os fótons em sinais analógicos e digitais para análise (ARGALL et al., 2003). O lidar pode apresentar duas configurações básicas: monoestático e biestático, ilustradas na Figura 2.

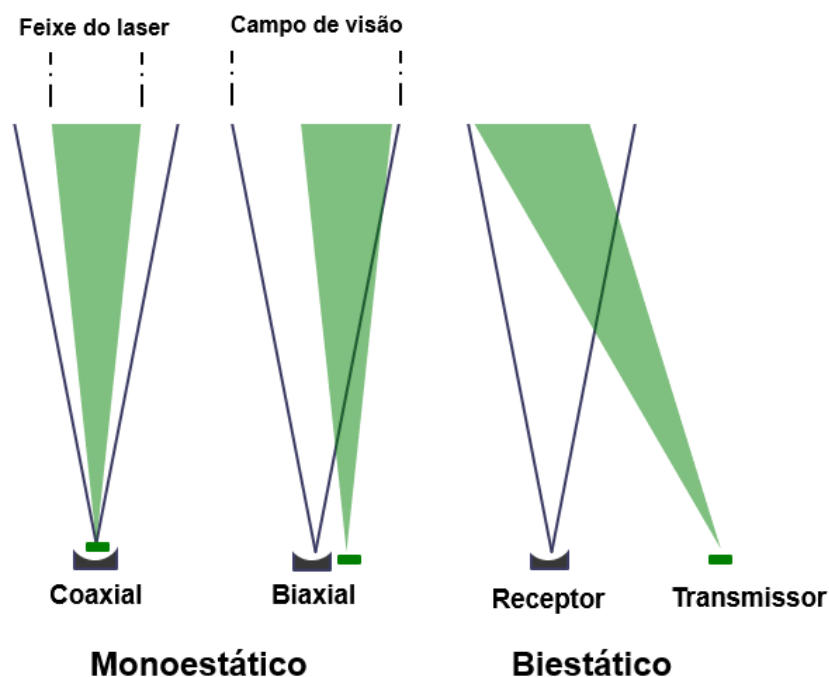


Figura 2: Possíveis configurações do sistema lidar. Fonte: Adaptado de ARGALL et al. (2002).

Como ilustrado na Figura 2, quando o sistema é biestático o transmissor e o receptor ficam afastados. Na configuração monoestática, o receptor e o transmissor se localizam no mesmo local. Além disso, o sistema monoestático pode ser subdividido em coaxial e biaxial (ARGALL et al., 2002).

No telescópio monoestático coaxial o eixo do feixe de laser transmitido coincide com o do receptor, enquanto no biaxial o eixo do laser é quase paralelo ao do telescópio, mas não é coincidente (KOVÁLEV et al., 2004). As diferentes configurações geométricas do sistema causam alterações na interceptação entre o laser e o campo de visão do telescópio, conhecida como função de *overlap*, e podem restringir o uso do lidar em determinadas situações.

4.2. Sistemas Inversos

Segundo Tarantola (2005), o estudo de um sistema físico (como exemplo, a atmosfera), pode ser dividido em três categorias:

- Parametrização do sistema: Encontrar um conjunto mínimo de parâmetros do modelo, os quais caracterizam completamente o sistema;
- Problema direto (*Forward modeling*): Com alguns valores dos parâmetros do modelo, determinam-se as leis físicas do sistema que permitem prever os resultados das medições de alguns parâmetros observáveis;
- Problema inverso (*Inverse modeling*): É o uso dos dados de medições de parâmetros observáveis para estimar valores dos parâmetros do modelo.

Problemas inversos podem ser formulados da seguinte forma (HANSEN, 1988):

$$\int_{\Omega} \text{entrada} \times \text{sistema} \, d\Omega = \text{saida}$$

Resumidamente, em problemas diretos estimam-se as *saídas* a partir das *entradas*, usando a descrição matemática do sistema estudado. Em um problema inverso, o objetivo é determinar quais as entradas (parâmetros do sistema) que dão a origem às saídas medidas.

No caso específico deste estudo, o mecanismo de interação entre a radiação incidente e um obstáculo pode ser classificado de duas maneiras: problemas diretos

ou inversos. Essa classificação dependerá de quais informações do sistema são conhecidas e quais se desejam obter (por exemplo, Figura 3) (SILVA, 2016).

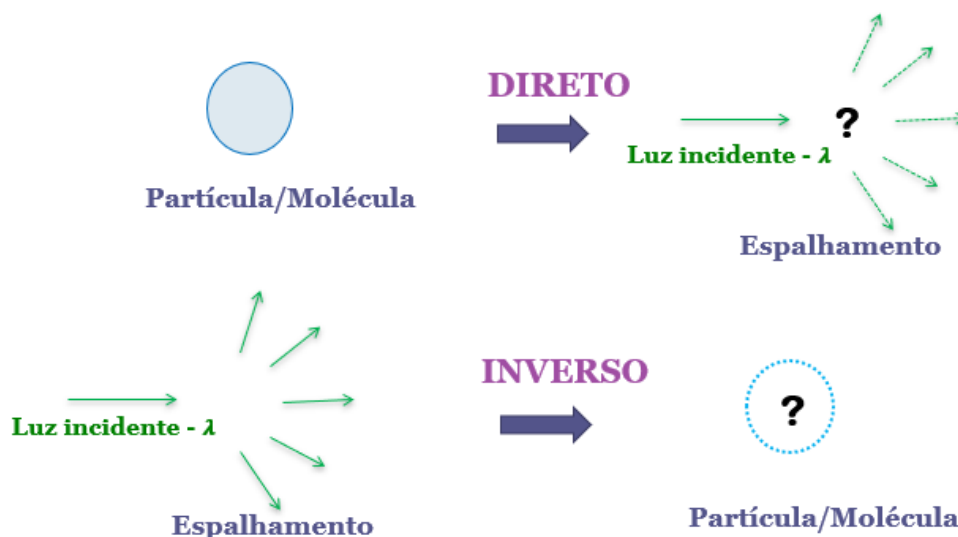


Figura 3 - Informações extraídas da interação luz e partícula. Fonte: Própria autoria, 2020.

Como ilustrado na Figura 3, quando se têm as características físicas e químicas da partícula (dimensão, forma, densidade, etc.) e deseja-se obter o espalhamento da luz incidente após a interação, pode-se considerar um problema direto. Porém, quando se tem apenas o espalhamento causado pela interação, e não há nenhum tipo de informação sobre a partícula/molécula causadora do mesmo, pode-se considerar um problema inverso.

Sendo assim, ao usar informações obtidas a partir do sistema lidar para extrair informações da atmosfera (por exemplo, a distribuição de tamanho de partículas), trata-se de um problema inverso. Problemas inversos são considerados problemas mal postos, para os quais não é possível obter uma solução por meio analítico (VELHO, 2008). O problema é caracterizado por informações incompletas disponíveis e pela não-unicidade das soluções (MÜLLER et al., 1999).

5. REVISÃO DA LITERATURA

Nesta seção apresentam-se de uma maneira sintetizada alguns trabalhos desenvolvidos aplicando algoritmos de inversão aos dados ópticos de sistemas lidar para a caracterização da atmosfera.

Müller et al. (1999), propuseram um método de inversão que permite recuperar os parâmetros físicos de distribuições de tamanho de partículas da atmosfera, como por exemplo: as concentrações de partículas para diferentes raios efetivos, o volume de partículas, área de superfície e sua quantidade, assim como o índice de refração médio complexo, a partir dos coeficientes de retroespalhamento e extinção em múltiplos comprimentos de onda obtidos por um sistema lidar. Seu algoritmo de inversão usa o conceito de inversão com regularização, baseado em uma matriz de suavização e o “peso” dessa suavização é obtido por validação cruzada generalizada.

Veselovskii et al. (2001), aplicaram um método de inversão com regularização, no qual, além da matriz de suavização, como propôs Müller et al. (1999), adicionou uma aproximação por soma de triângulos na inversão. O coeficiente peso de sua matriz de suavização foi selecionado por um método de mínima discrepância.

Böckmann et al. (2001), propuseram um algoritmo de inversão utilizando também um método com regularização. Contudo, sua proposta foi um processo de regularização que consiste em uma parte de discretização por projeção e uma parte de regularização.

A Tabela 1 apresenta outros autores que utilizaram dados ópticos de sistemas lidar para caracterização da atmosfera.

Tabela 1 - Alguns trabalhos desenvolvidos com os dados ópticos de sistemas lidar

Autores	Trabalhos
Chudzynski et al. (2001)	Lida com multicomprimentos de onda para medições de aerossol atmosférico.
Nishizawa et al. (2007)	Um algoritmo que recupera propriedades de aerossol a partir de medições de lidar polarizado de dual-comprimento de onda.
Osterloh et al. (2009)	Software paralelo para recuperação de distribuição de aerossol de dados LIDAR pelo sistema da EARLINET-ASOS.
Osterloh et al. (2011)	Um algoritmo de ponto base adaptado para a recuperação de propriedades microfísicas de aerossol

6. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

6.1. Aerossóis Atmosféricos

Definem-se aerossóis como sendo partículas líquidas e/ou sólidas suspensas em um gás (SEINFELD e PANDIS, 2006). A sua origem pode ser natural (gotículas de água, cristais de gelo, aerossóis marinhos, poeira, emissões vulcânicas, entre outros) ou antrópicas (queimadas, emissões veiculares e industriais). Existem também “aerossóis secundários”, cujas partículas se formam a partir de processos físicos e químicos de gases na atmosfera (“Conversão Gás - Partícula”, do inglês, Gas-to-particle Conversion - GPC) (COSTA et al., 2014).

Os aerossóis são retirados regularmente da atmosfera por meio de processos naturais, como chuvas, sedimentação e, também, a partir de reações que ocorrem entre as partículas. Ainda assim, a distribuição de aerossóis mantém-se quase constante (COSTA, 2012), pois os materiais particulados que os compõem possuem, em geral, tempo de permanência na atmosfera na ordem de dias ou semanas (SEINFELD e PANDIS, 2006). Ademais, a maior concentração encontra-se próxima a sua fonte principal de emissão, ou seja, a superfície terrestre.

Além disso, os aerossóis podem agir como núcleos de condensação de vapor, atuando na formação de nevoeiros, nuvens e precipitação, assim modificando ciclos hidrológicos (COSTA, 2012; COSTA et al., 2014). Além da influência nas mudanças climáticas, essas partículas também são prejudiciais à saúde humana, pois seus efeitos variam pela sua natureza química e dimensões.

A classificação dos aerossóis pode ser realizada a partir das suas dimensões, normalmente expressas por seu diâmetro aerodinâmico, d_a . Partículas com d_a inferior a 2,5 μm ($\text{PM}_{2,5}$) denominam-se partículas finas ou “moda fina”. As que possuem diâmetro entre 2,5 μm e 10 μm são as partículas grossas ou “moda grossa”. As que possuem diâmetro inferior a 10 μm (PM_{10}), são chamadas de “partículas inaláveis” (SEINFELD e PANDIS, 2006), as quais podem causar doenças no trato respiratório, enquanto as partículas mais finas são capazes de entrar até o nível de alvéolos pulmonares (POPE et al., 1995).

Nos últimos anos intensificaram-se os estudos sobre aerossóis devido a sua importância na regulação do clima da Terra (ALVES, 2005; ARTAXO et al., 2006;

OLIVEIRA, 2019; GUEDES, 2019). A atmosfera, seja em áreas urbanas ou não, contém concentrações significativas de partículas de aerossóis, às vezes chegando a 1.10^7 a 1.10^8 cm^{-3} (SEINFELD e PANDIS, 2006). Tais partículas são responsáveis pelo espalhamento e/ou absorção das radiações solares e terrestres, alterando assim o balanço radiativo atmosférico, que é a diferença da quantidade de radiação solar entre e sai da atmosfera terrestre. Como exemplo de partículas absorvedoras de radiação tem-se fuligem², a qual é associada a processos de combustão (motores, queima de biomassa, entre outros). Esse processo altera o perfil termodinâmico e a estabilidade da atmosfera do planeta (CASTRO, 2009).

O espalhamento de luz pela interação radiação-aerossol depende do tamanho da partícula. Por exemplo, quando o comprimento de onda incidente e o tamanho do aerossol estão na mesma ordem de grandeza, o efeito do espalhamento é mais intenso (ECHER et al., 2001).

Entre os modelos que estimam a distribuição de tamanho de partícula, a função lognormal tem sido muito utilizada para o estudo das propriedades de partículas de aerossóis na atmosfera (HEINTZENBERG, 1994).

Existe o conceito geral para a natureza das distribuições multimodais das concentrações de partículas de aerossóis na atmosfera, explicada pelas seguintes classificações (WHITBY, 1978).

- i. Nucleação: partículas de Aitken, que se originam, principalmente, de produtos de combustão e de nucleação heteromolecular na atmosfera, com diâmetro aerodinâmico entre 0,01 e 0,08 μm ;
- ii. Acumulação: origina-se da interação entre partículas já existentes na atmosfera com as que se formam por nucleação. São partículas com diâmetro aerodinâmico entre 0,08 e 2 μm .
- iii. Modas de partículas grossas: são originadas a partir de suspensão de poeiras, aerossóis marinhos, entre outros. São partículas que possuem diâmetro aerodinâmico superior a 2 μm .

² Material Orgânico residual formado na combustão, se constitui de partículas com formato aproximadamente esféricos (IPT, 2002).

A Figura 4 esquematiza as principais características das partículas de aerossóis de acordo com seu tamanho e, suas principais fontes e mecanismos de formação.

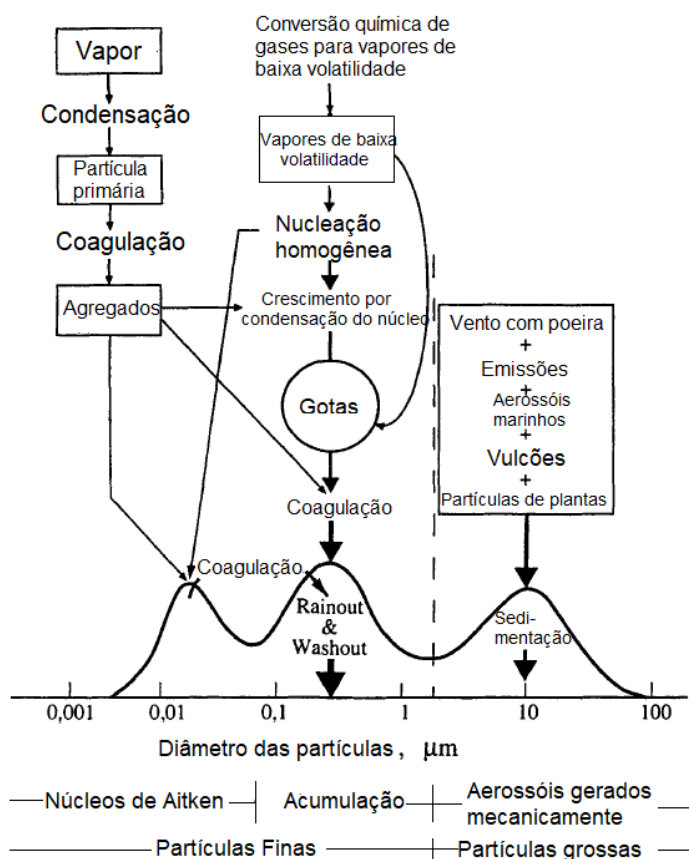


Figura 4 - Características das partículas de aerossol atmosférico de acordo com seu tamanho.

Fonte: Adaptado de Whitby e Cantrell (1976) *apud* Seinfeld e Pandis (2006).

6.2. Equacionamento Fundamental do Lidar

Segundo Wandinger (2005), o sinal detectado pelo sistema lidar, de uma maneira simplificada pode ser representado pela Equação 1.

$$P(z, \lambda) = K G(z, \lambda) \beta(z, \lambda) T(z, \lambda) \quad (1)$$

na qual: $P(z, \lambda)$ é a potência da radiação recebida pelo sistema de detecção, z é a distância entre o lidar e o alvo, λ é o comprimento de onda, K é o fator de desempenho do sistema, $G(z, \lambda)$ é a dependência geométrica em relação à distância (z), β é o

coeficiente de retroespalhamento e $T(z, \lambda)$ é a transmitância da luz emitida pelo lidar que foi perdida no percurso de ida e volta. Os termos β e T são as incógnitas da Equação 1, pois os outros termos são obtidos através da configuração do sistema lidar. O termo K pode ser reescrito como apresentado na Equação 2.

$$K = P_o \frac{c\tau}{2} A_o \varepsilon \quad (2)$$

em que: P_o é a potência média dos pulsos emitidos pelo laser, c é a velocidade da luz ($\approx 3 \cdot 10^8$ m/s), τ é o tempo de duração de cada pulso, A_o é a área do telescópio e ε é a eficiência do sistema na captação dos fótons retroespalhados. A resolução espacial do sistema é dada pela expressão $z = \frac{c\tau}{2}$, onde z é a resultante da diferença entre $z_1 = \frac{ct}{2}$ e $z_2 = \frac{c(t-\tau)}{2}$, em que o sinal é detectado pelo lidar em um tempo t .

O fator geométrico do sistema é dado pela Equação 3. Neste termo da equação geral do lidar (Equação 1), é incluída a função de sobreposição (*overlap*) do campo de visão do receptor ao feixe de luz do laser, $O(z)$, em relação à distância ao quadrado, z^2 .

$$G(z) = \frac{O(z)}{z^2} \quad (3)$$

A função *overlap* é resultante da sobreposição do campo de visão do receptor com o feixe do laser (Figura 5) (WANDINGER, 2005).

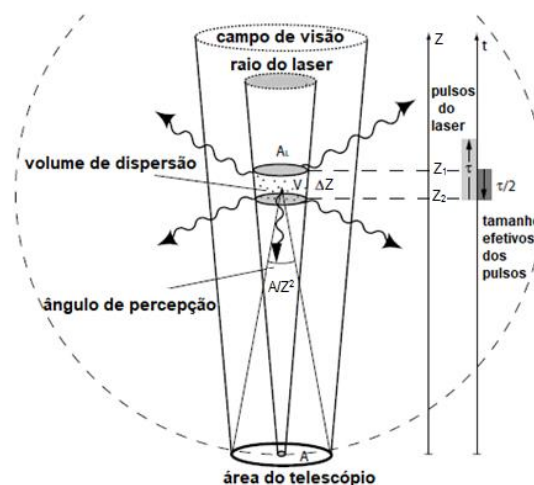


Figura 5 - Geometria do lidar. Fonte: adaptado de Wandinger (2005).

Quando o feixe do laser não está alinhado com o detector do sistema, o valor do *overlap* é considerado zero. E quando totalmente alinhado seu valor é igual a 1. Para telescópios com áreas grandes, A_o , o *overlap* pode afetar a captura da luz retroespalhada pelo lidar para longas distâncias (WANDINGER, 2005).

O principal parâmetro que determina como será a intensidade do sinal do lidar é o coeficiente de retroespalhamento $\beta(z, \lambda)$. A quantidade de luz retroespalhada, ou seja, a luz que retorna e é captada pelo receptor do lidar, é descrita por este coeficiente. Os valores obtidos para $\beta(z, \lambda)$, são específicos do espalhamento que ocorre em um ângulo θ de 180° (WANDINGER, 2005). O coeficiente de retroespalhamento pode ser escrito como na Equação 4.

$$\beta(z, \lambda) = \sum_j N_j(z) \frac{d\sigma_{j,esp}}{d\omega}(\pi, \lambda) \quad (4)$$

na qual: N_j é o número de partículas de tamanho j no volume iluminado pelo pulso de laser (Figura 5), e $\frac{d\sigma_{j,esp}}{d\omega}(\pi, \lambda)$ representa a seção transversal diferencial de retroespalhamento de luz pelas partículas de tamanho j ($\sigma_{j,esp}$) em um determinado comprimento de onda, λ , por unidade de ângulo sólido ω . A partir da Equação 4, obtém-se o somatório de todos os tipos de espalhamentos j que ocorrem na atmosfera. A concentração das partículas tem unidade de m^{-3} e a seção transversal de dispersão das mesmas m^2sr^{-1} . Sendo, assim, o coeficiente de retroespalhamento tem unidade de $m^{-1}sr^{-1}$.

O volume iluminado por um pulso de duração τ é dado pela Equação 5.

$$V = A_L \Delta z = \frac{A_L c \tau}{2} \quad (5)$$

Onde A_L é a seção transversal da faixa de laser e, a área total de espalhamento pelas N partículas contidas no volume V é:

$$A_s = N \sigma_{esp} V \quad (6)$$

ou seja, representa a soma das seções de espalhamento, σ_{esp} , de todas as partículas contidas no volume V . Assim, a intensidade relativa da luz espalhada é dada por

$$\frac{I_s}{I_o} = \frac{A_s}{A_L} = \frac{N\sigma_{esp}c\tau}{2} = \frac{4\pi\beta c\tau}{2} \quad (7)$$

em que I_s é a intensidade total de luz espalhada e I_o é a intensidade de luz emitida inicialmente pelo laser do lidar.

A intensidade da luz captada pelo detector, I_c , para um telescópio com área A , é dada pela Equação 8.

$$\frac{I_c}{I_o} = \frac{A\beta c\tau}{2z^2} \quad (8)$$

O termo do lado direito da Equação 8 descreve a geometria de espalhamento, isto é, contém o tamanho, as propriedades de retroespalhamento, volume de espalhamento e o ângulo de percepção do lidar (WANDINGER, 2005).

Na atmosfera, o espalhamento da luz incidente do laser é realizado por moléculas de ar e partículas (WANDINGER, 2005). Sendo assim, o coeficiente de retroespalhamento total $\beta(z, \lambda)$ pode ser escrito como apresentado a seguir.

$$\beta(z, \lambda) = \beta_{aer}(z, \lambda) + \beta_{mol}(z, \lambda) \quad (9)$$

O espalhamento molecular, β_{mol} , que ocorre principalmente devido à presença de nitrogênio (N_2) e moléculas de oxigênio (O_2), depende principalmente da densidade do ar e, por isso, diminui com a altitude (WANDINGER, 2005). A Figura 6 ilustra o comportamento do espalhamento da luz incidente do laser por partículas e moléculas em relação à altitude para o comprimento de onda 532 nm.

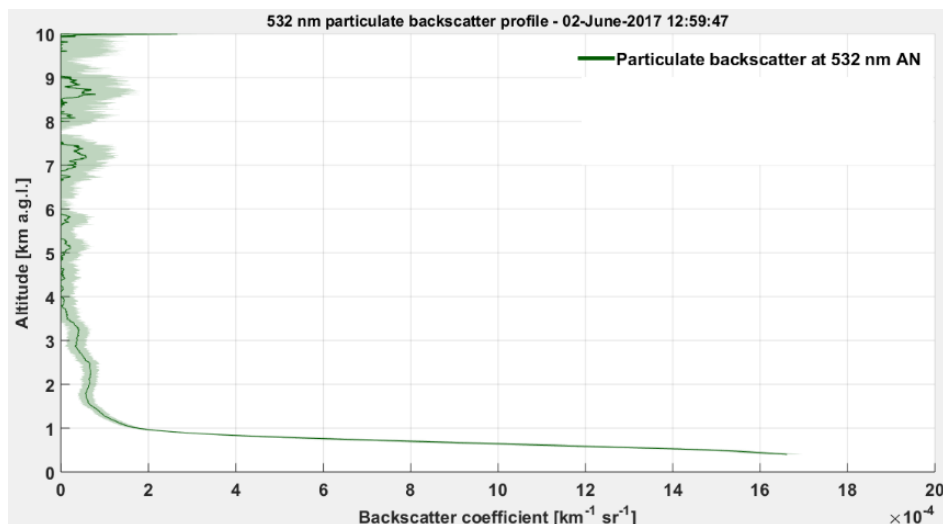


Figura 6: Perfil de retroespalhamento em relação à distância para $\lambda = 532$ nm. Fonte: Própria autoria, 2020.

A escala espacial e temporal do espalhamento realizado por partículas (β_{aer}) tem grande variação na atmosfera. A atmosfera é heterogênea, possuindo uma elevada variedade de partículas: as pequenas como contaminantes do ar (líquidas e sólidas), por exemplo, fuligem e compostos orgânicos. Outras maiores, como pó mineral, sal marinho e materiais biogênicos (pólen etc.). Ou as que são relativamente grandes, como nuvens, gotas de chuva, cristais de gelo, granizo e neve (WANDINGER, 2005).

O termo exponencial da equação do lidar (Equação 1) corresponde à transmissão da luz, a qual descreve a extinção de luz ao longo do caminho óptico percorrido por cada pulso, e possui valores entre 0 e 1. Segundo a lei de *Beer-Lambert-Bouguer*, Equação 10:

$$T(\lambda) = \exp(-2 \int_0^z \alpha(z, \lambda) dz) \quad (10)$$

O termo da integral considera a distância, z , entre o lidar e o alvo. O valor 2 corresponde ao caminho de transmissão de ida e volta. A soma de todas as perdas de transmissão é denominada de extinção (WANDINGER, 2005). A extinção de luz é dada pelo somatório de toda extinção da luz na atmosfera ao longo do caminho óptico, e $\alpha(z, \lambda)$ é o coeficiente de extinção, dado pela Equação 11.

$$\alpha(z, \lambda) = \sum_j N_j(z) \sigma_{aj,ext}(\lambda) \quad (11)$$

em que: N_j é a concentração de partículas de tamanho j , $\sigma_{aj,ext}$ é a seção transversal de extinção para cada tipo de partícula j . A concentração das partículas tem unidade de m^{-3} e a seção transversal de extinção delas tem unidade de m^2 , deste modo, o coeficiente de extinção tem unidade de m^{-1} .

A extinção pode ocorrer devido à absorção e espalhamento de luz por partículas e/ou moléculas. Assim, o coeficiente de extinção pode ser descrito como a soma desses mecanismos de interação luz e obstáculos, como apresentado na Equação 12.

$$\alpha(z, \lambda) = \alpha_{ab.aer} + \alpha_{ab.mol} + \alpha_{esp.aer} + \alpha_{esp.mol} \quad (12)$$

em que: $\alpha_{ab,aer}$ é o coeficiente de absorção das partículas, $\alpha_{ab,mol}$ é o coeficiente de absorção das moléculas, $\alpha_{esp,aer}$ é o coeficiente de espalhamento das partículas e $\alpha_{esp,mol}$ é o coeficiente de espalhamento das moléculas. Pelo fato da luz do laser espalhar em todas as direções contribui com a extinção da mesma. Sendo assim, a seção transversal de espalhamento σ_{esp} , com a seção transversal de absorção σ_{abs} , ambas com unidade m^2 , constituem a seção transversal de extinção, como definido na Equação 13.

$$\sigma_{ext} = \sigma_{asb} + \sigma_{esp} \quad (13)$$

Os coeficientes de extinção e retroespalhamento, $\alpha(z, \lambda)$ e $\beta(z, \lambda)$ são dependentes do comprimento de onda. Tal dependência é determinada pelo tamanho, índice de refração e forma das partículas e/ou moléculas (WANDINGER, 2005).

Os parâmetros que governam o espalhamento e absorção de luz em partículas esféricas são: o comprimento de onda da radiação incidente, λ ; o tamanho da partícula adimensional, w , que é a razão entre o diâmetro da partícula e λ ; o índice de refração com os termos real e imaginário (WANDINGER, 2005).

O índice de refração complexo, m , é a relação entre a velocidade da luz no vácuo, c , e a velocidade em que a luz passa por uma partícula. Em determinados

comprimentos de onda, este índice de refração tem uma forte dependência com a composição da partícula. Como citado anteriormente, algumas partículas têm uma maior capacidade de absorção da radiação incidente que interage com elas. Partículas mais absorvedoras da luz refletem valores diferentes de zero na parte imaginária do índice de refração complexo (SEINFELD e PANDIS, 2006).

Após definir cada termo da equação do lidar (Equação 1), ela pode ser reescrita como apresentado a seguir (Equação 14).

$$P(z, \lambda) = P_o \frac{c\tau}{2} A_o \eta \left(\frac{O(z)}{z^2} \right) \beta(z, \lambda) \exp \left[-2 \int_0^z \alpha(z, \lambda) dz \right] \quad (14)$$

O sinal detectado pelo sistema lidar sempre contém um ruído de fundo, “background”. O *background* é a luz externa captada pelo sistema, como, por exemplo, durante o dia, quando o sistema capta a luz solar espalhada e, durante a noite, quando pode captar a luz espalhada pela luz da lua, estrelas e fontes de luz artificial. Este ruído torna-se um sinal indesejado e deve ser retirado antes de qualquer análise ou uso dos dados ópticos do lidar (WANDINGER, 2005).

Outra correção que deve ser aplicada ao sinal original do lidar é pela distância, pois, para um dado ângulo sólido do feixe de luz, a irradiância diminui com a distância z proporcionalmente a z^2 .

6.2.1. Tratamento do sinal de retroespalhamento e testes instrumentais do lidar

Para que exista um controle na qualidade e uma homogeneização dos dados ópticos entre os diferentes sistemas do lidar espalhados pelo mundo, foram estabelecidos pela European Aerosol Research LIDAR Network (EARLINET) e implementados na Latin American LIDAR Network (LALINET) alguns testes instrumentais e de componentes do sistema lidar (informação verbal)³.

³ Apresentação do Profº Dr. Fábio Juliano da Silva Lopes na disciplina de Sensoriamento Remoto da Atmosfera com Lasers (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - Universidade de São Paulo) 03/2019.

Segundo as normas de qualidade dos dados, cada vez que se faz alguma medida com o lidar, é necessário realizar medida da “corrente escura” (termo em inglês *dark current*), pois o sinal detectado pelo lidar possui ruídos eletrônicos do próprio sistema. Com esse teste é possível captar estes ruídos e assim eliminá-los das medidas. Outros testes são realizados somente quando o *hardware* é alterado no sistema lidar (informação verbal)⁴, como:

- ✓ *Zero Bin*: Entre a emissão dos pulsos de luz e o registro do sinal, ocorre um atraso temporal. Com isso pode haver um deslocamento espacial do alvo, tendo como consequência uma distorção. Com o teste Zero, esse atraso é identificado e compensado;
- ✓ *Bin-Shift*: Identifica a defasagem entre os sinais analógico (AN) e de fotocontagem (PC) de cada canal;
- ✓ Outros dois testes que são efetuados em menor frequência (semestral ou anual), são:
 - *Telecover*: verifica o alinhamento de curto alcance e a qualidade da captação dos fótons pelo telescópio.
 - *Rayleigh fit*: verifica a qualidade do alinhamento do sistema lidar em longo alcance para, assim, determinar a altitude adequada para obter parâmetros que caracterizam a atmosfera.

6.3. Rede Aerosol Robotic Network - AERONET

A rede AERONET (AERosol Robotic NETwork) disponibiliza em seu *site* a distribuição de tamanho de aerossóis, além de outras propriedades ópticas de toda a coluna atmosférica. Tais propriedades são obtidas a partir de algoritmos de inversão

⁴ Nota de aula dada pelo Profº Dr. Fábio Juliano da Silva Lopes na disciplina de Sensoriamento Remoto da Atmosfera com Lasers (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - Universidade de São Paulo) 03/2019.

desenvolvidos por Dubovik e King, (2000), Dubovik et al. (2004) e Dubovik et al. (2006). Que utilizam como entrada dos programas as medidas diárias por fotômetros que compõem sua rede (AERONET)⁵.

O projeto AERONET é uma rede de sensoriamento remoto de aerossóis com medidas a partir do solo. Criado pela NASA e PHOTONS (PHOtométrie pour le Traitement Opérationnel de Normalisation Satellitaire – Universidade de Lille, França). O projeto se expandiu com o auxílio de outros colaboradores como: agências nacionais, pesquisadores e parcerias como a do Instituto de Física da Universidade de São Paulo. A AERONET é composta por mais de 500 fotômetros solares espalhados pelo mundo. Com isso, a rede contém um banco de dados de domínio público e rico em informações como: propriedades ópticas, microfísicas e radiativas de aerossóis que compõem a coluna atmosférica (AERONET, 2016)⁶.

O fotômetro realiza medidas tanto nos ângulos almucantar quanto no plano principal (Figura 7).

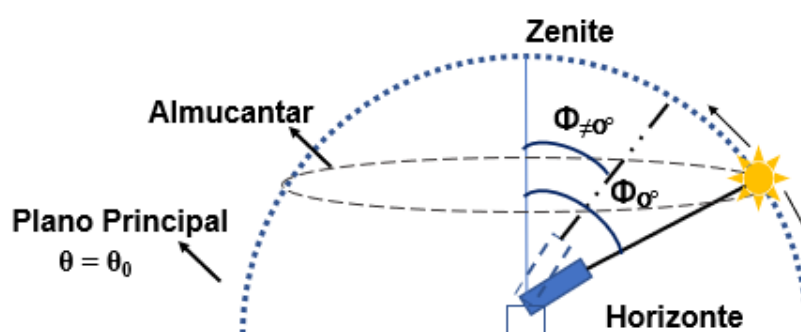


Figura 7: Sistema de posições de medição de um fotômetro fixado em solo que capta a radiação solar direta. Fonte: Adaptado de Castanho, 2005.

O almucantar é determinado com um ângulo solar zenital (Φ) fixo e alterando o ângulo azimutal (θ). Já o plano principal, é composto por um plano vertical fixo no Sol no ângulo azimutal e alterando no ângulo zenital. A radiância espalhada é captada no almucantar solar: próxima ao horizonte; no plano principal: próximo ao zênite. Os ângulos do almucantar e do plano principal têm como sistema de referência o Sol (ângulo zero). No almucantar, quando em sentido horário: ângulos positivos e quando

⁵ Documento: https://aeronet.gsfc.nasa.gov/new_web/Documents/Inversion_products_V2.pdf

⁶ Site AERONET: <https://aeronet.gsfc.nasa.gov/>

em sentido anti-horário: ângulos negativos. No plano principal, para cima os ângulos: positivos e para baixo: negativos (CASTANHO, 2005).

Na rede AERONET são usados fotômetros solares multibandas automáticos CIMEL 318, que realizam a medição da irradiância espectral do sol e radiâncias do céu. O modelo mais recente da AERONET é o CE318-T que também realiza medições noturnas da irradiância espectral lunar, dividido em três tipos: *Standard*, *Polarizado* e *Seaprism*, com os seguintes comprimentos de onda (AERONET, 2020)⁷:

- *Standard* (TS9) e o *Polarizado* (TP9): com 9 filtros (λ : 340, 380, 440, 500, 675, 870, 937, 1020, 1640 nm);
- *Seaprism* (TV9): com 9 filtros (λ : 412, 440, 500, 531, 550, 675, 870, 937, 1020 nm).

Os fotômetros são conectados a sistemas eletrônicos que transferem os dados de medidas a cada 1 hora ou, a cada meia hora para as estações da AERONET via três satélites (GOES, METEOSAT ou GMS)⁸. O esquema está representado na Figura 8.

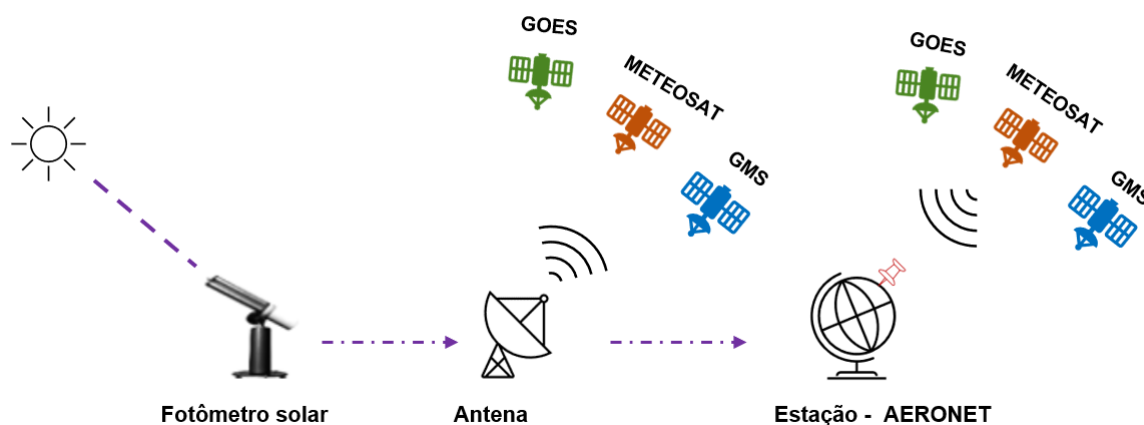


Figura 8 - Esquema da transmissão de dados da rede AERONET. Fonte: Própria autoria, 2020.

⁷ Site AERONET: https://aeronet.gsfc.nasa.gov/new_web/system_descriptions_instrument.html

⁸ Site AERONET: https://aeronet.gsfc.nasa.gov/new_web/system_descriptions_transmission.html

6.3.1. Algoritmo de inversão AERONET

O algoritmo atual de inversão da AERONET é denominado de Versão 3 e está detalhado no documento: AERONET Inversion Products (Version 3)⁹ lançado em 2019.

No algoritmo da AERONET, pode ser realizada a inversão da radiância simultânea de todos os comprimentos de onda disponíveis. Dependendo do modelo de radiômetro, as medidas de radiância são realizadas em todos ou alguns dos seguintes canais espectrais: 380, 440, 500, 675, 870, 1020 e 1064 nm (AERONET, 2020)¹⁰. No método de inversão são adotadas algumas das seguintes condições:

- As partículas de aerossóis são classificadas em dois tipos: esféricas e não esféricas. As esféricas são modeladas por um conjunto de esferas polidispersas e homogêneas (considerando o índice de refração complexo o mesmo para todos os tamanhos de partículas). As não esféricas são modeladas por uma mistura polidispersa de esferoides homogêneos distribuídos de forma aleatória;
- A razão da concentração dos esferoides é determinada experimentalmente por Dubovik et al. (2006);
- A atmosfera é considerada como um plano paralelo;
- A distribuição vertical da concentração de aerossol é suposta homogênea para a inversão no almucantar e dupla camada para inversões do plano principal;
- A inversão estatisticamente otimizada e os erros de aproximações são obtidos sob a hipótese de erros não correlacionados com a função lognormal. Essa otimização é responsável por diferentes níveis de precisão nas medições (por exemplo, o desvio padrão para o erro na profundidade óptica $\tau(\lambda)$ é assumido equivalente a 0,01 e o desvio padrão para erro nas medições de radiância vertical é de 5%.

⁹ Toda a descrição mais aprofundada do algoritmo de inversão está disponível em:

https://aeronet.gsfc.nasa.gov/new_web/Documents/Inversion_products_for_V3.pdf

¹⁰ Site AERONET: https://aeronet.gsfc.nasa.gov/new_web/system_descriptions_instrument.html

Informações mais detalhadas estão em Dubovik e King (2000), Dubovik (2004) e Dubovik et al. (2006b).

Partindo da equação da espessura óptica (Equação 15) para um sistema linear é determinada a distribuição volumétrica de tamanho de aerossol (DTA) pelo algoritmo da AERONET¹¹.

$$\begin{aligned} \tau_{esp}(\lambda) \cdot P(\theta, \lambda) &= \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{K_{esp}(\theta, \lambda, m, r)}{j_n(r)} x_n(\ln r) d \ln r \\ &\approx K_{esp}(\theta, \lambda, n, k) x_n \end{aligned} \quad (15)$$

Onde $P(\theta, \lambda)$ é a função de fases (APENDICE A), x representa a função de distribuição de tamanho de partículas, o índice n ($n = 0, 1, 2, 3$) denota o tipo de distribuição se: numérica, por área ou volumétrica.

A concentração de aerossol disponível no sistema AERONET é apresentada em termos de volume de partícula por área de atmosfera, como apresentado na Equação 16.

$$\frac{dV_a(r)}{d(\ln r)} = V(r) \frac{dN}{d(\ln r)} = \frac{4}{3} \pi r^3 \frac{dN}{d(\ln r)} \quad [\mu\text{m}^3/\mu\text{m}^2] \quad (16)$$

6.4. Interação Luz-Aerossol

Ao atingir uma partícula de aerossol a luz incidente faz com que as cargas elétricas presentes nas partículas sejam excitadas em movimento oscilatório. Então, as cargas que foram excitadas irradiam energia em todas as direções (espalhamento) ou convertem uma parcela da luz em energia térmica (absorção) (SEINFELD e PANDIS, 2006). A Figura 9 ilustra os possíveis processos de interação dos pulsos de luz com uma partícula suspensa.

¹¹ Todo equacionamento do algoritmo usado pela AERONET para a inversão e obtenção das DTAs estão apresentados em Dubovik e King (2000).

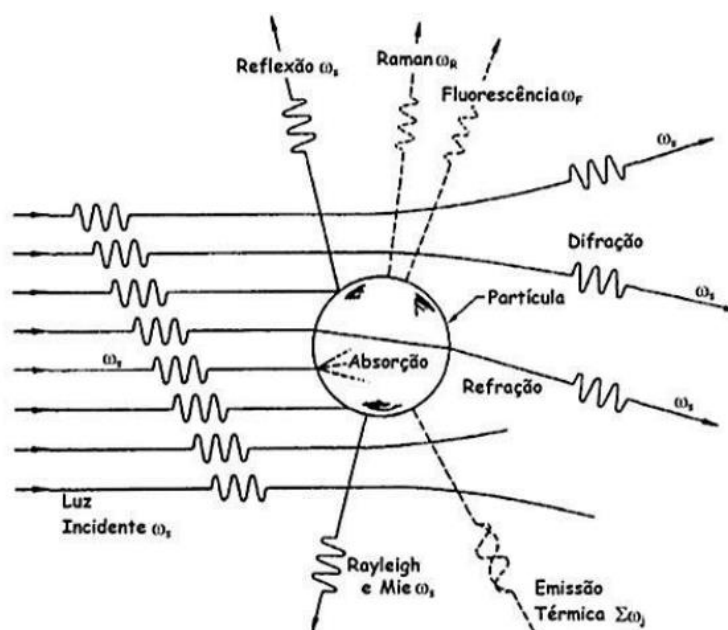


Figura 9: Mecanismos de interação da luz com uma partícula. Fonte: Figura adaptada de Seinfeld e Padis (2006)

Como ilustrado na Figura 9, o espalhamento/absorção por partículas e moléculas ocorre por diferentes processos, os quais podem ser classificados como inelásticos, quase-elásticos e elásticos. Os processos de espalhamento inelástico incluem espalhamento Raman e fluorescência, nos quais, após a interação luz-partícula, o comprimento de onda incidente é alterado (WANDINGER, 2005). No mecanismo quase-elástico o comprimento de onda muda devido aos efeitos Doppler e ampliação da difusão. No espalhamento elástico, o comprimento de onda da luz incidente se mantém o mesmo, após a interação com a partícula (WANDINGER, 2005).

O espalhamento da luz incidente pode ser caracterizado por diferentes abordagens teóricas, entre as quais se destacam os espalhamentos Rayleigh e Mie.

➤ Espalhamento Rayleigh

O espalhamento que descreve a interação da radiação solar com moléculas atmosféricas foi formulado em 1871 por Rayleigh. A teoria do espalhamento Rayleigh é aplicável a moléculas e/ou partículas muito pequenas quando comparadas com o comprimento de onda da radiação incidente (normalmente partículas com raio aerodinâmico menor que $0,1 \mu\text{m}$), não absorventes e esféricas (KOVALEV, 2004).

A irradiância espalhada por uma partícula pequena (não importando seu formato), quando comparada ao comprimento de onda, é proporcional a λ^{-4} . Ou seja, com o aumento do comprimento de onda, a intensidade da luz espalhada diminui significativamente (WANDINGER, 2005).

➤ **Espalhamento Mie**

O espalhamento Mie ocorre quando existem essencialmente partículas esféricas (absorventes ou não absorventes) presentes na atmosfera com tamanho da mesma ordem de grandeza do comprimento de onda da radiação incidente. A intensidade de espalhamento Mie é maior do que no espalhamento de Rayleigh. Segundo Bohren et al. (1983) o espalhamento Mie é utilizado de forma generalizada para determinar o espalhamento e absorção de luz por qualquer partícula esférica em função do comprimento de onda.

O equacionamento detalhado do espalhamento Mie está apresentado no APÊNDICE A.

6.5. Obtenção Dos Coeficientes Ópticos Das Partículas Atmosféricas: Sistema Lidar

A partir do sinal detectado pelo lidar, tanto elásticos como inelásticos dado pelo espalhamento Raman, podem ser obtidos os perfis dos coeficientes de retroespalhamento e extinção das partículas de aerossol presentes na atmosfera. Esses coeficientes estão em função do tamanho da partícula, índice de refração complexo das partículas e do comprimento de onda da radiação incidente (SEINFELD e PANDIS, 2006).

As seções a seguir apresentam dois métodos usados para se obter a partir das os coeficientes de retroespalhamento, β_{aer} , e extinção, α_{aer} .

6.5.1. Lidar elástico

Partindo da Equação geral do lidar (Equação 14) os termos $\beta(z, \lambda)$ e $\alpha(z, \lambda)$ representam os coeficientes totais da atmosfera, ou seja, das moléculas e partículas (ANSMANN e MÜLLER, 2005), podendo ser escritos das seguintes formas (Equações 17 e 18).

$$\beta(z, \lambda) = \beta_{mol}(z, \lambda) + \beta_{aer}(z, \lambda) \quad (17)$$

$$\alpha(z, \lambda) = \alpha_{mol}(z, \lambda) + \alpha_{aer}(z, \lambda) \quad (18)$$

Assim, a Equação do lidar (Equação 14) pode ser reescrita da seguinte forma (Equação 19).

$$S(z) = E_o A \eta \left(\frac{O(z)}{z^2} \right) [\beta_{mol} + \beta_{aer}] \exp \left[-2 \int_0^z (\alpha_{mol} + \alpha_{aer}) dz \right] \quad (19)$$

em que o sinal do lidar corrigido por z^2 é $S(z)$, ou seja, $S(z) = P(z) z^2$. Supõe-se que a partir de uma certa altitude há uma sobreposição completa do feixe do laser com o detector; então a função *overlap* ($O(z)$) é igual a 1. O termo E_o é a resultante do produto de $P_o \tau$. Os coeficientes $\beta_{mol}(z)$ e $\alpha_{mol}(z)$ podem ser encontrados a partir de dados de temperatura e pressão medidos por radiossonda (Ansmann e Müller, 2005). Assim, apenas as propriedades dos aerossóis, $\beta_{aer}(z)$ e $\alpha_{aer}(z)$, são as incógnitas da Equação 19.

Segundo Ansmann e Müller (2005) a razão de lidar, ou seja, a razão entre os coeficientes de retroespalhamento e extinção, é definida para aerossóis pela Equação 20, $\beta_{aer}(z)$ e $\alpha_{aer}(z)$:

$$L_{aer}(z, \lambda) = \frac{\alpha_{aer}(z, \lambda)}{\beta_{aer}(z, \lambda)} \quad (20)$$

Essa definição é baseada na razão de lidar utilizada para os parâmetros moleculares (Equação 21):

$$L_{mol}(z) = \frac{\alpha_{mol}}{\beta_{mol}} = \frac{8\pi}{3} sr \quad (21)$$

No entanto, a razão de lidar para aerossóis é variável, dependendo da concentração, tamanho, forma e composição química das partículas (ANSMANN e MÜLLER, 2005).

Inserindo a Equação 20 na 17, obtém-se a seguinte expressão (Equação 22):

$$Y(z, \lambda) = L_{aer}[\beta_{mol}(z, \lambda) + \beta_{aer}(z, \lambda)] \quad (22)$$

Substituindo $\alpha_{aer}(z, \lambda)$ e $\alpha_{mol}(z)$ da Equação 19 com as Equações 20 e 21, e inserindo na Equação 22, tem-se:

$$S(z, \lambda) L_{aer}(z) \exp\left[-2 \int_0^z \beta_{mol}(z, \lambda) dz\right] = E_o \eta \exp\left[-2 \int_0^z Y(z, \lambda) dz\right] \quad (23)$$

Tomando o logaritmo de ambos os lados da Equação 23 e derivando em relação à distância z , obtém-se:

$$d \ln \frac{S(z, \lambda) L_{aer}(z) \exp\left[-2 \int_0^z [L_{aer}(z, \lambda) - L_{mol}(z, \lambda)] \beta_{mol}(z, \lambda) dz\right]}{dz} = \frac{1}{Y(z)} \frac{dY(z)}{dz} - 2Y(z) \quad (24)$$

Essa Equação 24, conhecida como Equação de Bernoulli, pode ser resolvida para a seguinte condição de contorno:

$$Y(z_o) = L_{aer}[\beta_{mol}(z_o) + \beta_{aer}(z_o)] \quad (25)$$

Obtendo-se,

$$\beta_{mol}(z, \lambda) + \beta_{aer}(z, \lambda) = \frac{S(z, \lambda) \exp\left[-2 \int_{z_o}^z [L_{aer}(z, \lambda) - L_{mol}(z, \lambda)] \beta_{mol}(z, \lambda) dz\right]}{S(z, \lambda) / (\beta_{mol}(z, \lambda) + \beta_{aer}(z, \lambda)) \left[-2 \int_{z_o}^z L_{aer}(z, \lambda) S(z, \lambda) T(z, z_o) dz\right]} \quad (26)$$

Em que,

$$T(z, z_0) = \exp \left[-2 \int_{z_0}^z [L_{aer}(z') - L_{mol}] \beta_{mol}(z') dz' \right] \quad (27)$$

No intervalo de z_0 na Equação 26, geralmente escolhe-se uma região em que β_{aer} é desprezível comparado a β_{mol} (MEASURES, 1992). Deste modo, é possível obter o perfil do coeficiente de extinção dos aerossóis a partir da solução para $\beta_{aer}(z)$ pela Equação 28.

$$\alpha_{aer}(z, \lambda) = L_{aer}(z, \lambda) \beta_{aer}(z, \lambda) \quad (28)$$

Essa técnica é nominada de método de inversão de Klett-Fernald-Sasano (ANSMANN et al., 2005). A partir dessa técnica, é possível estimar os coeficientes para atmosfera não homogênea pelas medidas realizadas por um sistema lidar (KLETT, 1981).

O parâmetro de entrada crítico no método Klett-Fernald-Sasano (KFS) é a razão lidar ($L_{aer}(z, \lambda)$), a qual depende de propriedades químicas e morfológicas das partículas e da umidade relativa da atmosfera (ANSMANN e MÜLLER, 2005).

Pelo fato dos coeficientes $\beta_{aer}(z, \lambda)$ e $\alpha_{aer}(z, \lambda)$ variarem com a altura (seção 6.2), ($L_{aer}(z, \lambda)$). conseqüentemente, também depende da altura na atmosfera (ANSMANN e MÜLLER, 2005). Reagan et al., (2001) apresentam faixas de L_{aer} para diferentes tipos de aerossóis (para $\lambda \approx 550$ nm), como por exemplo: partículas marinhas $\approx 20 - 30$ sr; partículas continentais (céu limpo) $\approx 30 - 50$ sr; partículas continentais (poluição urbana) $\approx 50 - 80$ sr, partículas de poeira do deserto $\approx 30 - 40$ sr e fuligem (combustão da biomassa) $\approx 45 - 65$ sr.

6.5.2. Lidar Raman

O lidar Raman mede os sinais elásticos e inelásticos de retroespalhamento causado por moléculas nitrogênio e/ou oxigênio (ANSMANN e MÜLLER, 2005). Devido à baixa intensidade desses sinais, esse tipo de lidar é usado principalmente durante o período da noite, devido à ausência da forte luz solar. No entanto, com a aplicação de filtros adequados, as observações Raman lidar agora também são possíveis durante o dia com resolução temporal e espacial apropriada (ARSHINOV e BOBROVNIKOV, 1999; ANSMANN e MÜLLER, 2005).

Diferente do método apresentado anteriormente, o coeficiente de extinção das partículas de aerossol, α_{aer} , é determinado de forma independente do coeficiente de retroespalhamento, β_{aer} . Ou seja, não é necessário impor suposições sobre o sistema lidar e as condições da atmosfera, como por exemplo, a razão lidar (ANSMANN e MÜLLER, 2005). A Equação 29 descreve o sinal Rayleigh dado pelo espalhamento Raman, para a molécula de Nitrogênio, por exemplo,

$$P(z, \lambda_{Ra}) = E_o A \eta_{\lambda_{Ra}} \left(\frac{O(z, \lambda_{Ra})}{z^2} \right) \beta_{Ra}(z, \lambda_o) \exp \left[- \int_0^z (\alpha(r, \lambda_o) + \alpha(r, \lambda_o)) dz \right] \quad (29)$$

O termo $\beta_{Ra}(z, \lambda_o)$ representa o coeficiente de retroespalhamento Raman, $\alpha(z, \lambda_o)$ é o coeficiente de extinção no caminho de ida do laser com um comprimento de onda de λ , e $\alpha(z, \lambda_{Ra})$ é o coeficiente de extinção no caminho de volta do laser, após interação luz-molécula, com um comprimento de onda Raman λ_{Ra} (WEITKAMP, 2005).

O coeficiente de retroespalhamento molecular é determinado a partir da densidade molecular N_{Ra} (nitrogênio, N_2 , ou oxigênio, O_2), da seção transversal $\frac{d\sigma_{Ra}}{d\Omega(\pi, \lambda_o)}$ para o processo de espalhamento no comprimento de onda do laser λ_o e ângulo de dispersão π :

$$\beta_{Ra}(z, \lambda_o) = N_{Ra}(z) \frac{(d\sigma_{Ra})}{d\Omega}(\pi, \lambda_o) \quad (30)$$

O termo $\beta_{Ra}(\lambda_o)$ é idêntico ao β_{mol} na Equação (17). O perfil da densidade molecular é calculado a partir de medidas de radiossondas ou temperatura padrão da atmosfera e perfis de pressão variando com a altitude (ANSMANN e MÜLLER, 2005).

Ao inserir a Equação 30 na Equação 29, e aplicando a função logarítmica em ambas as equações, diferenciando-as na respectiva distância, z , e rearranjando, obtém o coeficiente de extinção total (Equação 31).

$$\alpha(z, \lambda_o) + \alpha(z, \lambda_{Ra}) = \frac{d}{dz} \ln \frac{N_{Ra}(z)}{S(z, \lambda_{Ra})} + \frac{d}{dz} \ln O(z, \lambda_{Ra}) \quad (31)$$

Com o sinal molecular corrigido pela distância ao quadrado, $S(z, \lambda_{Ra}) = z^2 P(z, \lambda_{Ra})$. O termo do *overlap* não precisa ser considerado em longas distâncias, deste modo, fica $O(R, \lambda_{Ra}) \equiv 1$. Em algumas especificações sistemas de lidar, o *overlap* entre o campo de visão do receptor e da luz do laser pode ser alcançado por volta de 300 m de distância (ADAM e MARENCO, 2016).

Em casos que o sistema lidar não alcance o *overlap* a partir de distâncias superiores (por exemplo, 2000 a 3000 m), a faixa de medição pode ser aumentada, corrigindo os efeitos do *overlap*. Segundo WANDINGER e ANSMANN (2001), as correção do perfil do *overlap* podem ser realizadas a partir de medidas do lidar sob condições do céu claro.

A relação da função *overlap* é apresentada na Equação 32,

$$\frac{d}{dz} \ln O(z, \lambda_{Ra}) = \frac{1}{O(z, \lambda_{Ra})} \frac{d}{dz} O(z, \lambda_{Ra}) \quad (32)$$

A determinação do coeficiente de extinção, α , é relativamente sensível às incertezas do *overlap* próximo ao lidar, devido ao fato que o valor desse parâmetro é baixo e muda rapidamente com a distância (ANSMANN e MÜLLER, 2005).

Com as devidas correções do *overlap*, o termo da Equação 31, também pode ser considerado igual. Assim, a partir da Equação 18 pode-se escrever a Equação 33,

$$\begin{aligned} & \alpha_{aer}(z, \lambda_0) + \alpha_{aer}(z, \lambda_{Ra}) \\ & = \frac{d}{dz} \ln \frac{N_{Ra}(z)}{S(z, \lambda_{Ra})} - \alpha_{mol}(z, \lambda_0) - \alpha_{mol}(z, \lambda_{Ra}) \end{aligned} \quad (33)$$

Para determinar o α_{aer} relativo ao λ_0 da luz incidente, é necessária a introdução do expoente de Ångström, $\tilde{a}(z)$, que descreve a dependência de α_{aer} com λ (ANSMANN e MÜLLER, 2005).

$$\frac{\alpha_{aer}(z, \lambda_0)}{\alpha_{aer}(z, \lambda_{Ra})} = \left(\frac{\lambda_{Ra}}{\lambda_0} \right)^{\tilde{a}(z)} \quad (34)$$

Obtendo assim,

$$\alpha_{aer}(z, \lambda_0) = \frac{\frac{d}{dz} \ln \frac{N_{Ra}(z)}{S(z, \lambda_{Ra})} - \alpha_{mol}(z, \lambda_0) - \alpha_{mol}(z, \lambda_{Ra})}{1 + \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_{Ra}}\right)^{\hat{a}(z)}} \quad (35)$$

Diferentemente do algoritmo Klett-Fernald-Sasano, nenhuma suposição sobre termos da Equação 35 é necessária. Todos os termos de densidade molecular e espalhamento, podem ser calculados a partir de dados meteorológicos ou de características padrões da atmosfera (ANSMANN e MÜLLER, 2005). O único valor adotado, é para o expoente de Ångström ($\hat{a}(z) = 1,0$).

O coeficiente de retroespalhamento de partículas, β , pode ser determinado a partir da razão entre o sinal de retroespalhamento de aerossol e o sinal de retroespalhamento molecular (COONEY et al. (1969) e MELFI (1972)).

O coeficiente de retroespalhamento de aerossol, $\beta_{aer}(z, \lambda_0)$, é função do comprimento de onda do laser, λ_0 e, pode ser determinado usando os sinais retroespalhamento total (de partículas e moléculas), β_{total} , ou só retroespalhamento molecular, β_{mol} . São usadas as duas medidas do sinal do lidar, a de ida da luz do laser, $P(z, \lambda_0)$, e de volta $P(z, \lambda_{Ra})$ em relação à distância z_0 e z . Com a razão entre $P(z_0, \lambda_{Ra}) P(z, \lambda_0)$, medidas do retroespalhamento total, β_{total} , e $P(z_0, \lambda_0) P(z, \lambda_{Ra})$, medidas a partir do retroespalhamento molecular, β_{mol} (ANSMANN et al., 1992),

$$\frac{P(z_0, \lambda_{Ra}) P(z, \lambda_0)}{P(z_0, \lambda_0) P(z, \lambda_{Ra})} \quad (36)$$

Inserindo a razão apresentada na Equação 36 nas respectivas equações lidar, e reorganizando a equação resultante tem-se,

$$\begin{aligned} \beta_{aer}(z, \lambda_0) + \beta_{mol}(z, \lambda_0) &= [\beta_{aer}(z_0, \lambda_0) + \beta_{mol}(z_0, \lambda_0)] \frac{P(z_0, \lambda_{Ra}) (P(z, \lambda_0) N_{Ra}(z))}{P(z_0, \lambda_0) P(z, \lambda_{Ra}) N_{Ra}(z_0)} \\ &\times \frac{\exp\{-\int_{z_0}^z [\alpha_{aer}(r, \lambda_{Ra}) + \alpha_{mol}(r, \lambda_{Ra})] dr\}}{\exp\{-\int_{z_0}^z [\alpha_{aer}(r, \lambda_0) + \alpha_{mol}(r, \lambda_0)] dr\}} \end{aligned} \quad (37)$$

Se os dois canais de sinal estiverem corretamente alinhados, de modo que $O(R, \lambda_{Ra}) = O(R, \lambda_0)$, os efeitos do *overlap* serão cancelados devido o perfil de β ser determinado a partir do perfil da razão $\frac{P(z, \lambda_0)}{P(z, \lambda_{Ra})}$ (ANSMANN e MÜLLER, 2005).

De acordo com Ansmann e Müller (2005), no algoritmo Klett-Fernald-Sasano, deve ser estimado um valor de referência para o retroespalhamento de partículas em na distância z_0 . Para que os efeitos de incertezas sejam reduzidos nesta estimativa, é indicado selecionar uma região da troposfera, onde o espalhamento ocorra apenas por moléculas (espalhamento de Rayleigh). Assim, apenas as propriedades de densidade do ar devem ser determinadas para a solução da Equação 37 (ANSMANN e MÜLLER, 2005). Com isso, são usados novamente os dados da radiossonda ou dados padrão da atmosfera para determinar a densidade do ar e os termos β_{mol} .

A taxa da transmissão causada pelas partículas, para a faixa de distância entre z_0 e z , é obtida com o perfil do coeficiente de partículas, α_{aer} . Contudo, supõe-se que α_{aer} depende do comprimento de onda λ^{a} , conforme a Equação 33 (ANSMANN E MÜLLER, 2005).

Assim, tem-se a razão lidar em relação à distância, como apresentado na Equação 38.

$$L_{aer} = \frac{\alpha_{aer}(z, \lambda_0)}{\beta_{aer}(z, \lambda_0)}, \quad (38)$$

Assim, os perfis de $\alpha_{aer}(z, \lambda_0)$ e $\beta_{aer}(z, \lambda_0)$, Equações 35 e 37, são obtidos de forma independente para sistema lidar em que o laser está voltado para direção zenital.

6.6. Equacionamento para Estimativa da Distribuição de Tamanho de Aerossóis (DTA)

Para a determinação da distribuição de tamanho de aerossóis, normalmente o problema de inversão é formulado como uma integral de primeira ordem de *Fredholm* (MULLER et al., 1999; OSTERLOH et al., 2013). As seguintes relações valem para os coeficientes de retroespalhamento e extinção, Equação 39 e 40, respectivamente.

$$\beta_i(\lambda_i) = \int_0^{\infty} K_{\beta}(m, r, \lambda_i) n(r) dr \quad (39)$$

$$\alpha_i(\lambda_i) = \int_0^{\infty} K_\alpha(m, r, \lambda_i) n(r) dr \quad (40)$$

Em que r é o raio das partículas de aerossóis, m é o índice de refração complexo, λ_i é o comprimento de onda. O termo $n(r)$ é a função de interesse, que representa a distribuição da concentração numérica de tamanhos de partículas por intervalo dr . Reescrevendo as Equações 37 e 38 de um modo genérico, obtém-se:

$$g_j(\lambda_i) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} K_j(m, r, \lambda_i) n(r) dr + e_j^{exp} \quad (41)$$

Em que o índice j representa β ou α , e $g(\lambda)$ representa os coeficientes ópticos experimentais no comprimento de onda λ . Quando se têm dados experimentais, devem-se inserir erros experimentais e_j^{exp} . Aqui, os limites da integração são fixados pela faixa de raios das partículas em estudo, r_{max} e r_{min} . O termo K_j é a função de Kernel, a qual leva em consideração a forma das partículas, comprimento de onda, λ , e índice de refração complexo, m (MULLER et al., 1999).

O índice de refração complexo, m , varia de acordo com os tipos de partículas presentes na atmosfera e a umidade da atmosfera (WANG et al., 2015). A parte real do índice de refração representa a capacidade de espalhamento da luz incidente, enquanto a parte imaginária representa a capacidade de absorção (DUBOVİK et al., 2000). Segundo DUBOVİK et al. (2000), a parte real do índice de refração complexo pode variar ($1,33 \leq m_R \leq 1,6$) e parte imaginária ($0,0005 \leq m_I \leq 0,5$).

As funções de Kernel podem ser estimadas a partir da teoria de *Mie* em caso de partículas esféricas e podem ser expressas em termos de distribuição numérica, área de superfície externa ou volumétrica (MULLER et al., 1999; VESELOVSKII et al., 2002; BÖCKMANN, 2001). Deste modo, K_j é calculado pela relação entre as eficiências de extinção e retroespalhamento e a área da seção transversal da partícula πr^2 (Equação 30) (MULLER et al., 1999). Segundo Böckmann (2001) a função Kernel expressa em distribuição volumétrica é mais "suave" quando comparada à numérica. Deste modo, alguns autores (MÜLLER et al., 1999; VESELOVSKII et al., 2002; OSTERLOH et al., 2013) utilizam a função de Kernel volumétrica em problemas inversos. A Equação 42 apresenta a função de Kernel numérica.

$$K_j = \pi r^2 Q_j(r, m, \lambda) \quad (42)$$

As concentrações da área-superficial e volumétrica total são dadas pelas Equações 43 e 44, respectivamente (OSTERLOH et al., 2013).

$$a_{\text{total}} = 4\pi \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r^2 n(r) dr = 3 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r^{-1} v(r) dr \quad (43)$$

$$v_{\text{total}} = \frac{4\pi}{3} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r^3 n(r) dr = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} v(r) dr \quad (44)$$

Assim, a distribuição volumétrica de tamanho de partículas é expressa na seguinte forma:

$$g_j(\lambda_i) = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{3}{4r} Q_j(m, r, \lambda_i) v(r) dr \quad (45)$$

Em que Q_j representa as eficiências de retroespalhamento e de extinção, obtidas a partir da teoria de Mie.

$$Q_{\text{ext}}(w, m) = \frac{2}{w^2} \sum_{k=1}^{\infty} (2k+1) [|a_k|^2 + |b_k|^2] \quad (46)$$

$$Q_{\text{esp}}(w, m) = \frac{2}{w^2} \sum_{k=1}^{\infty} (2k+1) \text{Re}[a_k + b_k] \quad (47)$$

Aqui, m é o índice de refração da partícula, w é o tamanho adimensional em relação ao tamanho da partícula e comprimento de onda, $w = \frac{d\pi}{\lambda_i}$, o termo k é o número de iterações e os coeficientes de Mie, a_k e b_k , são obtidos a partir das Equações 48 e 49, respectivamente.

$$a_k = \frac{\alpha \psi'_k(y) \psi_k(\alpha) - y \psi'_k(\alpha) \psi_k(y)}{\alpha \psi'_k(y) \xi_k(\alpha) - y \xi'_k(\alpha) \psi_k(y)} \quad (48)$$

$$b_k = \frac{y \psi'_k(\alpha) \psi_k(y) - \alpha \psi'_k(y) \psi_k(\alpha)}{y \xi'_k(\alpha) \psi_k(y) - \alpha \psi'_k(y) \xi_k(\alpha)} \quad (49)$$

Em que $y = wm$ e as funções Riccati-Bessel, $\psi_k(w)$ e $\zeta_k(w)$ são encontradas conforme o equacionamento completo no APÊNDICE A.

Quando se determina a função Kernel, K_j , para diferentes comprimentos de ondas e raios, obtêm-se um conjunto de dados que irão compor a matriz óptica, A_j (MULLER et al., 1999; VESELOVSKII et al., 2002). Com isso, a equação generalizada de *Fredholm* (Equação 41) pode ser aproximada por um somatório usando quadratura numérica, transformando a integral em uma equação linear (Equação 50).

$$g_{ij} = \sum A_j(m, r, \lambda_i)v(r) + e_j^{exp} \quad (50)$$

Na qual g é o vetor que contém os valores dos coeficientes ópticos ($\alpha(\lambda)$ e $\beta(\lambda)$), e_j^{exp} representa os erros experimentais, A_j é a matriz óptica e v a função de distribuição volumétrica de tamanho de partículas de aerossóis. Reescrevendo em forma matricial, a Equação 50 se torna:

$$g_{ij} = A_j v + e \quad (51)$$

Em que os N valores ópticos g e os erros experimentais e estão na forma vetorial $N \times 1$. A função v também está na forma vetorial $M \times 1$, e a matriz óptica A , uma matriz $N \times M$.

No entanto, a inversão da matriz A , na forma da Equação 51, para estimar a distribuição volumétrica de tamanhos de partículas $v(r)$, não é possível porque a matriz óptica A é uma matriz quase-singular (MÜLLER et al., 1999).

$$v^* = A_j^{-1} g_{ij} \quad (52)$$

Devido a isso, é necessário adotar técnicas de inversão adequadas para solucionar esse tipo de problema, e assim, analisar estatisticamente o comportamento da distribuição volumétrica de tamanho de partículas de aerossóis.

6.7. Redes Neurais Artificiais

A Rede Neural Artificial (RNA), é baseada na estrutura de um sistema inteligente. Sua estrutura é composta por elementos processadores simples e

conectados entre si, nomeados de neurônios. Os neurônios têm a capacidade de receber inúmeras informações e correlacioná-las com respostas.

Geralmente, a técnica de RNA é empregada na simulação de processos não lineares complexos e com um padrão ruidoso (VON ZUBEN, 1996), nos quais é difícil obter um modelo fenomenológico. A Figura 10 ilustra um exemplo de estrutura de uma RNA.

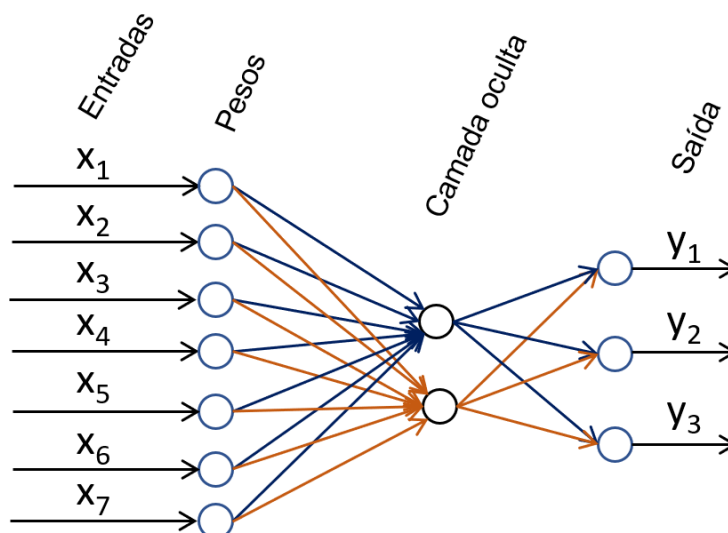


Figura 10 – Exemplo de uma estrutura de Rede Neural Artificial. Fonte: Própria autoria, 2020.

O processamento por esta técnica ocorre em dois estágios: aprendizado (ajuste de parâmetros - pesos) e validação do modelo.

O aprendizado pode ser realizado de três modos (VON ZUBEN e CASTRO, 2003a):

- **Supervisionado:** quando se usa parâmetros externos que indicam à RNA a resposta desejada para o padrão de entrada;
- **Não supervisionado (auto-organização):** sem o uso de qualquer tipo de informação externa que indica a resposta desejada para os padrões de entrada;
- **Reforço:** quando um crítico externo avalia a resposta fornecida pela Rede Neural Artificial.

Aplicando o processo de RNA supervisionada, as informações conhecidas das entradas e saídas são fornecidas, e um conjunto de pesos associados aos dados e

propagados à camada oculta (neurônios) é ajustado. Nos neurônios se realiza a soma ponderada das entradas e é aplicada uma função resposta de cada neurônio (Figura 11). O valor obtido das saídas é otimizado pela minimização do erro quadrático entre valores esperados e calculados. Um algoritmo frequentemente usado para isso é a retropropagação (termo em inglês *backpropagation*), em que a função de erro calculada é propagada de volta pela rede e os pesos são ajustados. Esse processo é repetido até se obter um erro menor que um valor pré-fixado, por exemplo (FABRO, 2001; SILVA, 2019).

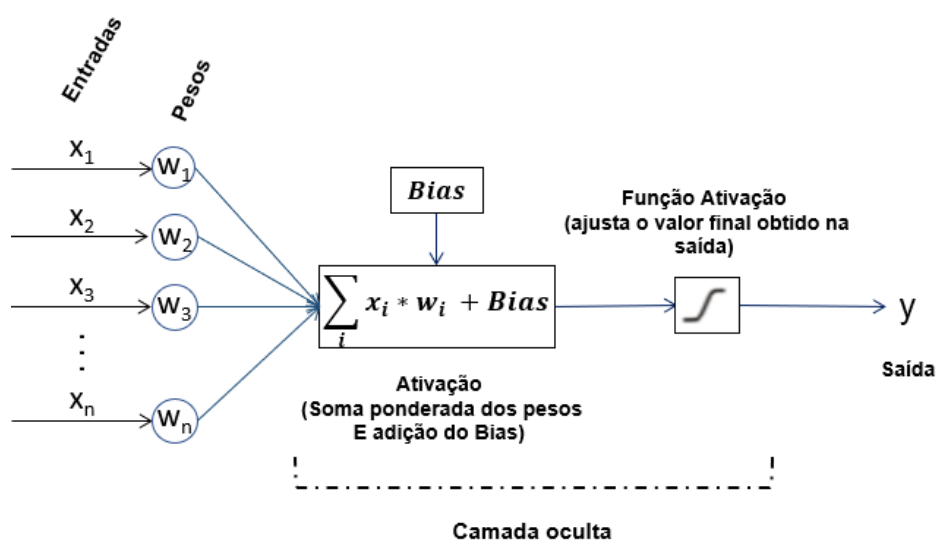


Figura 11 – Modelo não-linear de uma Rede Neural Artificial. Legenda: O termo bias: tem o efeito de aumentar ou diminuir o argumento da função de ativação. Fonte: Adaptado de HAYKIN, 2001.

O algoritmo de retropropagação, pertence à classe de algoritmos de treinamento supervisionados, sendo uma derivação do método do gradiente descendente. Tal método usa um esquema iterativo para encontrar um mínimo local ou global de uma função objetivo, em que a cada passo se toma a direção negativa do gradiente, que corresponde à direção de declive da função objetivo (VON ZUBEN e CASTRO, 2003b; SILVA, 2019). Das diversas funções de ativação aplicadas ao processo de aprendizagem, as mais comuns são: Função degrau e a sigmoide (Figura 12).

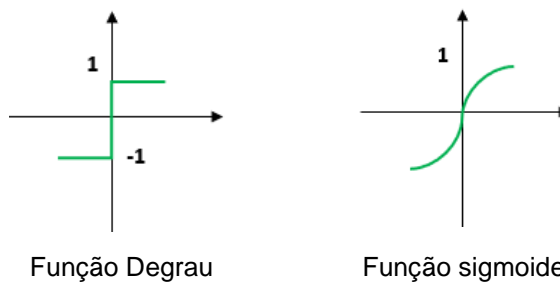


Figura 12 - Exemplos de funções de ativação

A segunda etapa envolve a validação da RNA, na qual se usa um conjunto de dados diferente daqueles usados para o treinamento da rede. Os resultados obtidos pela RNA (resultados calculados) são comparados com os resultados experimentais, a fim de verificar se o modelo está prevendo satisfatoriamente o comportamento obtido experimentalmente, de acordo com um critério de tolerância adotado. Ou seja, a rede é considerada treinada quando ao se inserir um dado x à sua entrada, a rede irá retornar um valor de saída próximo ao valor esperado (FABRO, 2001).

7. METODOLOGIA

O presente trabalho foi dividido em algumas etapas, as quais de forma resumida estão ilustradas na Figura 13.

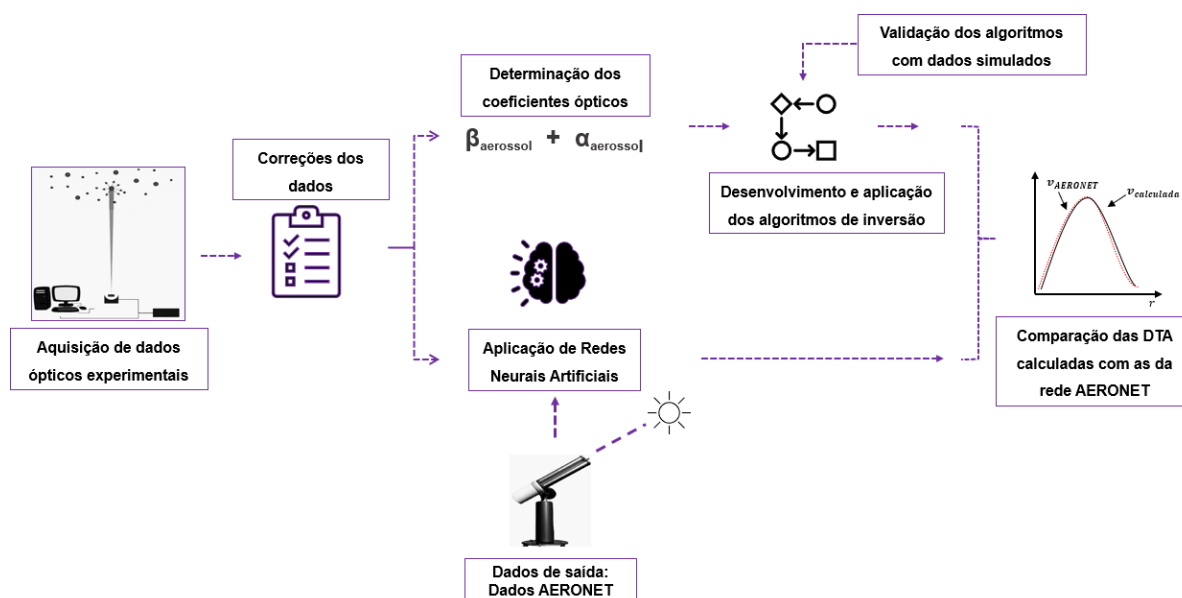


Figura 13 - Fluxograma das etapas executadas no presente trabalho. Fonte: Próprio autor, 2020.

Na qual, o termo DTA é a distribuição volumétrica de tamanho dos aerossóis.

7.1. Aquisição e Correção dos Dados do Sistema Lidar

As medidas do lidar usadas neste trabalho foram coletadas e fornecidas pelo grupo de pesquisa do Laboratório de Aplicações Ambientais a Laser (LAAL) - IPEN. Os dados ópticos foram obtidos a partir de um sistema lidar localizado no Centro de Lasers e Aplicações (CLA) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN, na cidade de São Paulo. Esse sistema lidar possui um laser Nd: YAG comercial, de configuração monoestático e coaxial e apontado para o zênite. Com uma resolução espacial de 7,5 m, *overlap* a partir de 300 m de distância do lidar, o sistema possui comprimento de onda fundamental de 1064 nm. Através de um cristal não linear tem-se a geração do segundo e terceiro harmônicos, 532 e 355 nm, respectivamente. O sistema tem uma taxa de repetição de 10 Hz com duração de pulso de 6 ± 2 ns. A energia máxima de saída por pulso é de 850 mJ para 1064 nm, 400 mJ para 532 nm

e 230 mJ para 355 nm. O detector identifica a radiação retroespalhada e os separa em seis diferentes canais (Elásticos: 355, 532 e 1064nm, e os sinais Raman: 387, 408 e 530 nm). A Figura 14 mostra o lidar utilizado.

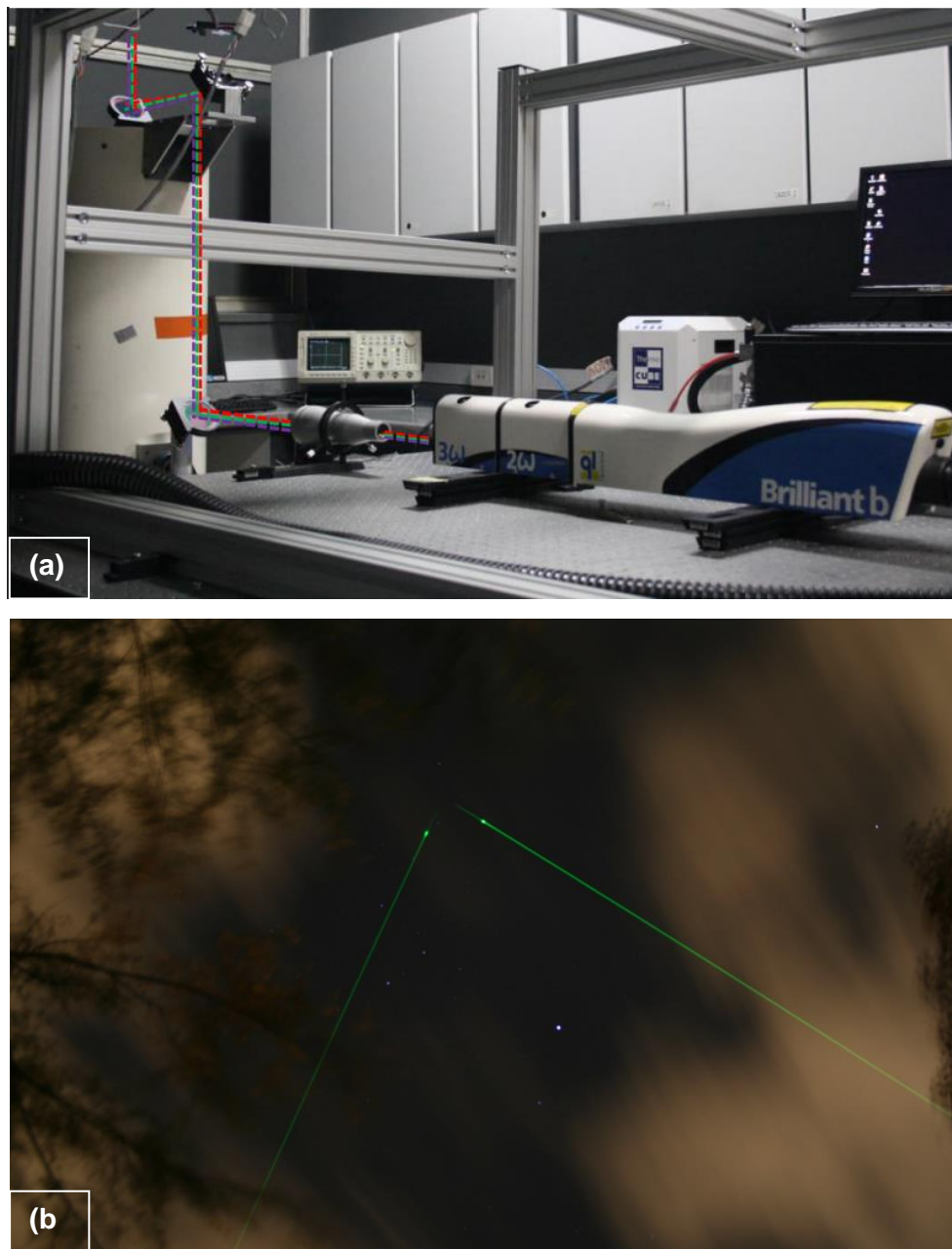


Figura 14 - (a) Sistema lidar utilizado. (b) Luzes incidentes de dois sistemas de lidar. Fonte: (a) concedida pelo grupo de pesquisa LAAL; (b) concedida por Ricardo E. Sammad do CLA- IPEN.

Os sinais de luz retroespalhada e detectada pelo lidar são convertidos em sinais elétricos que, por sua vez, são processados e gravados por um sistema eletrônico.

7.2. Método de Inversão Klett-Fernald-Sasano: Determinação dos Coeficientes de Retroespalhamento do Canal 1064 nm

Para essa etapa, foi usado um *software* desenvolvido pelos pesquisadores Dr. Fábio J. S. Lopes e Dr. Gregori A. Moreira do LAAL - IPEN.

Quando salvos, os sinais elétricos são gravados como dados binários, que devem ser convertidos e passar por um pré-processamento para eliminar possíveis ruídos entre outros ajustes necessários, antes de qualquer tipo de aplicação dos mesmos. A Figura 15 apresenta as etapas do programa de pré-processamento.

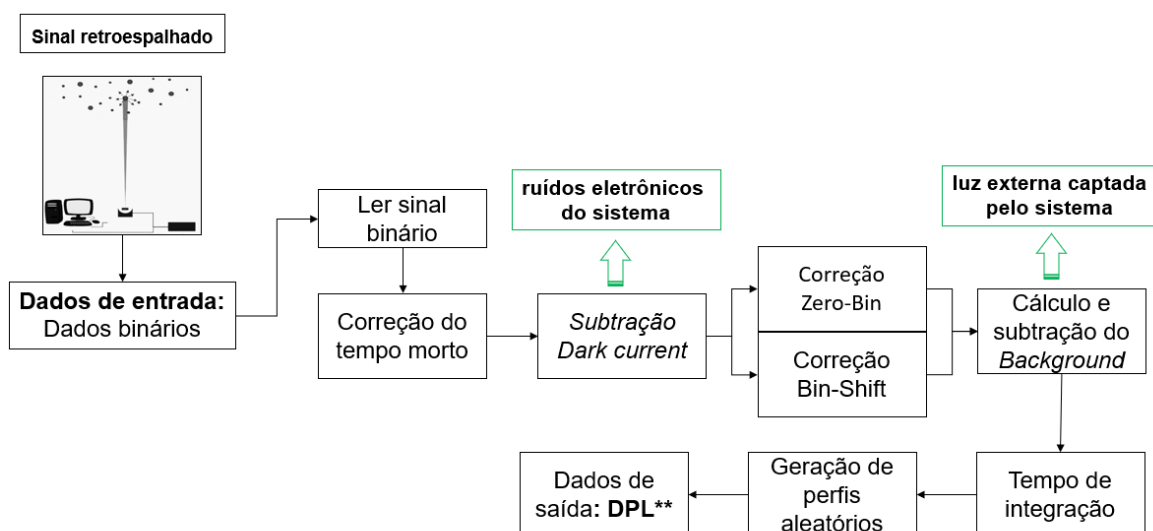


Figura 15- Fluxograma da pré-processamento dos dados experimentais do lidar. **DPL: Dados Pré Processados do Lidar. Fonte: Própria autoria, 2020.

As correções e testes realizados no pré-processamento dos dados do lidar, estão descritos na seção 6.2.1.

Após esse pré-processamento, os dados são processados por um algoritmo de inversão pelo método de KFS, como apresentado na seção 6.5.1. Neste trabalho, este método foi aplicado para a obtenção dos coeficiente ópticos de retroespalhamento do canal 1064 nm. A Figura 16 ilustra de uma forma sintetizada todos os procedimentos executados no algoritmo desenvolvido pelos mesmos pesquisadores.

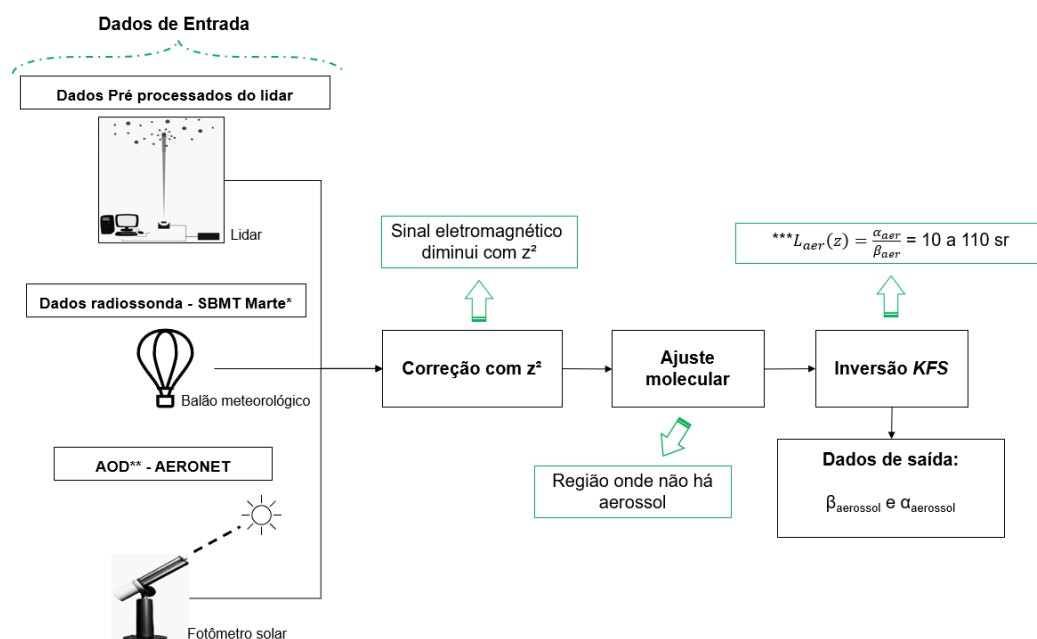


Figura 16: Fluxograma da etapa do pré-processamento dos dados experimentais do lidar. Legenda: * Dados de radiossonda retirados do sistema da Universidade de Wyoming; ** Profundidade óptica de aerossol (termo em inglês Aerosol Optical Depth (AOD)); ***Reagan et al. (2001). Fonte: Própria autoria, 2020.

Como entradas do programa apresentado na Figura 16, são usados os dados do pré-processamento (DPL), os dados de radiossonda retirados do sistema da Universidade de Wyoming para a cidade de São Paulo no mês no qual foram realizadas as medidas pelo lidar e o valor da profundidade óptica de aerossol (AOD), estimada a partir dos dados retirados do sistema da rede Aerosol Robotic Network (AERONET) no dia das medidas.

São realizadas outras correções antes de aplicar a inversão pelo método KFS: correção pela distância ao quadrado (z^2) e o ajuste molecular. Como explicado na seção 6.2, z^2 faz o sinal eletromagnético do lidar diminuir. Por isso, antes de realizar a inversão para obter $\beta_{aer,1064 \text{ nm}}$, os dados são corrigidos multiplicando por z^2 . Em relação ao ajuste molecular, deve-se sempre escolher uma região na qual se tenha a certeza (ou se suponha) que não há presença de aerossóis, somente de moléculas (WEITKAMP, 2005).

7.3. Método de Inversão Raman: Determinação dos Coeficientes de Retroespalhamento e Extinção dos Canais 355 e 532 nm

O *software* usado para obter os coeficientes β_{aerossol} e α_{aerossol} dos canais 355 e 532 nm foi desenvolvido pelos pesquisadores Dr. Mikhail Korenskiy, Dr. Alexei Kolgotin e Dr. Igor Veselovskii, do Physics Instrumentation Center of the General Physics Institute (Moscou, Rússia). O Figura 17 apresenta de forma sintetizada o fluxograma das etapas do processo para a inversão Raman (descrito na seção 6.5.2) para determinar os coeficientes ópticos.

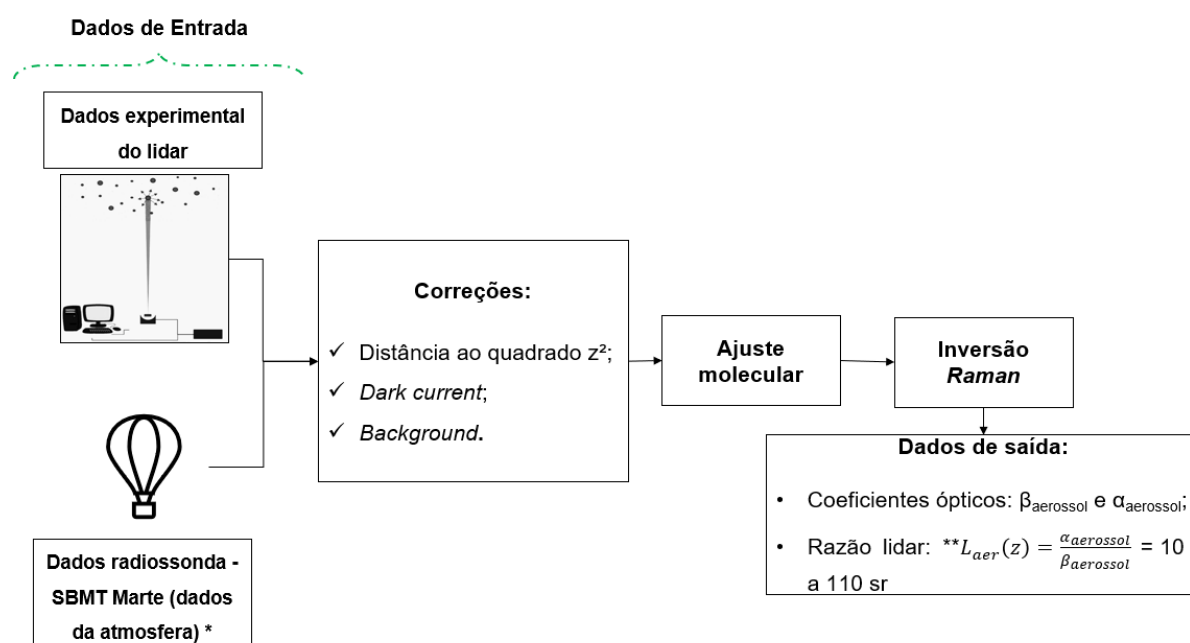


Figura 17- Fluxograma das etapas da obtenção dos coeficientes ópticos por inversão Raman. Legenda: * Dados de radiossonda retirados do sistema da Universidade de Wyoming. ** Reagan et al. (2001). Fonte: Própria autoria, 2020.

Como entradas do programa foram usados os dados de medidas do sistema lidar e as informações de radiossonda do sistema da Universidade de Wyoming para a cidade de São Paulo. Como no método de KFS, são realizadas as correção pela distância ao quadrado (z^2), *dark current* (ruídos eletrônicos do próprio sistema), *background* (luz externa captada pelo sistema) e o ajuste dos coeficientes de

retroespalhamento e extinção molecular utilizando dados de temperatura e pressão medidos por meio de radiossondas.

7.4. Aplicação das Técnicas de inversão – Recuperação da Distribuição volumétrica de tamanho de Aerossol

Para os algoritmos desenvolvidos, foram usados como entradas 3 coeficientes de retroespalhamento e 2 coeficientes de extinção, pois as informações que cada um dos coeficientes se completa e auxilia em uma caracterização mais real da atmosfera. Isso porque cada coeficiente contém diferentes informações sobre os aerossóis presentes na atmosfera. Essa quantidade de coeficientes β e α foi escolhida de acordo com trabalhos encontrados na literatura (VESELOVSKII et al. (2002) e BÖCKMANN (2001)). A Tabela 2 apresenta o conjunto de coeficientes ópticos selecionados.

Tabela 2 - Coeficientes de retroespalhamento e extinção estudados

Coeficientes	Comprimento de onda λ
3β	355, 532 e 1064 nm
2α	355 e 532 nm

Para o presente estudo, os coeficientes de extinção e retroespalhamento (α e β , respectivamente) dos canais 355 e 532 nm foram obtidos a partir do método de inversão Raman (IR). Já o coeficiente de retroespalhamento do canal 1064 nm, foi obtido pelo método de inversão Klett-Fernands-Sasano (KFS) (seção 7.2).

Além disso, para os valores dos índices de refração para as partículas de aerossóis, foram usados os valores disponíveis no sistema AERONET (de acordo com os horários Coordinated Universal Time (UTC) nas datas selecionadas para estudo).

Com o objetivo de simplificar o desenvolvimento dos algoritmos apresentados a seguir, as partículas de aerossóis foram consideradas esféricas e homogêneas.

7.4.1. Técnica de Inversão - Regularização de Phillips - Twomey (RPT)

Phillips (1961) e Twomey (1962) desenvolveram soluções numéricas para a integral de primeira ordem de *Fredholm* (Equação 41). Os autores introduziram uma suavização controlada que resulta da solução obtida pela inversão da aproximação por quadratura da Equação 41.

$$g_j(\lambda_i) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} K_j(m, r, \lambda_i) n(r) dr + e_j^{exp}$$

Para a aplicação da técnica de regularização de Phillips-Twomey (RPT), parâmetros como os coeficientes de extinção $\alpha(\lambda)$ e retroespalhamento $\beta(\lambda)$, os comprimentos de onda λ e os valores de índice de refração das partículas de aerossóis m devem ser conhecidos (SILVA, 2016). Aplicando uma solução por mínimos quadrados na Equação 51,

$$g_{ij} = A_j v + e$$

obtem-se:

$$v = (A_j^T A_j)^{-1} A_j^T g_{ij} \quad (53)$$

Contudo, pelo fato da matriz A_j ser mal condicionada, a solução por mínimos quadrados torna-se inviável, e um erro de quadratura nos dados de entrada pode afetar intensamente o erro no resultado. Quando as variáveis possuem uma maior magnitude se sobressaem nos cálculos, tendo por consequência um acúmulo de erros, provocando uma oscilação nos resultados (TWOMEY, 1962).

Segundo Phillips (1961) um modo de suavizar essa oscilação causada pelos erros é solucionada ao adicionar na Equação 41 informações *a priori* sobre a função v^* . Como informações *a priori* o autor indica inserir uma função penalidade $B(v)$ que irá resultar na suavização da função v . A função a ser minimizada é apresentada na Equação 54.

$$e^2 \geq \min_f \{|A_j v - g|^2 + \gamma B(v)\} \quad (54)$$

$B(v)$ é uma medida escalar não-negativa. Para estimá-la pode-se adotar o método apresentado por Phillips (1961) e Twomey (1962; 1977), utilizando

minimização dos quadrados da segunda diferença, como apresentado na Eq. (53). Esta diferença corresponde à derivada segunda da função, ou “rugosidade” da função.

$$B(v) = \min_f \sum_i (v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1})^2 \quad (55)$$

Quando a soma dos quadrados da segunda diferença for usada para determinar $B(v)$, pode-se reescrever a função em forma matricial, como apresentado a seguir:

$$B(v) = (Kv) * Kv = v * K * Kv \quad (56)$$

Em que K é uma matriz dada por:

$$K = \begin{bmatrix} 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ -1 & 2 & -1 & \cdot \\ \cdot & -1 & 2 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}$$

O produto $(K^T K)$ dessa matriz é denominado de matriz de suavização H , dada por:

$$H = \begin{bmatrix} -1 & 2 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -2 & 5 & -4 & 1 & 0 & \dots & \dots \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -4 & 5 & -2 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \quad (57)$$

Deste modo, a expressão final da função v permanece:

$$v = (A_j^T A_j + \gamma H)^{-1} A_j^T g_{ij} \quad (58)$$

Nessa equação, γ é um multiplicador de regularização, que irá definir o peso da matriz H na suavização da função. A matriz de Kernel, A , contém as informações dos espalhamentos de luz na atmosfera.

Para a aplicação do método de RPT, a matriz A foi determinada a partir do método apresentado por Eliçabe (1990).

a) Multiplicador de Lagrange

O multiplicador de regularização γ (ou multiplicador de Lagrange) é um parâmetro fundamental na técnica da regularização. Essa ferramenta matemática é utilizada para otimização de funções, permitindo determinar os extremos (mínimo ou máximo) de uma função sujeita a restrições (MARCHAND, 2016).

Os valores desse termo podem variar entre $[0; \infty)$, quando $\gamma \rightarrow \infty$ o processo de minimização leva a $B(v) = 0$, ou seja, uma solução extremamente suave. Porém, o resultado será sempre o mesmo, independentemente dos coeficientes ópticos g . Por consequência, irá aumentar o erro residual. Contudo, quando $\gamma \rightarrow 0$ é como se não houvesse sido aplicada a suavização da função v . Os valores de γ devem ser estipulados dentro de uma faixa ideal para se obter um comportamento menos oscilante para a função v .

O multiplicador de Lagrange pode ser determinado por diferentes métodos. O que os diferem são os requisitos de informações necessárias para a aplicabilidade do método, como o número e tipo de dados de entrada (*input*); o máximo de erros aceitáveis; a escolha de suposições adicionais que serão usadas para obter soluções (por exemplo, um pré-conhecimento do erro de medição, ou a correlação entre os dados dentro de um conjunto). Dentre os métodos, as abordagens mais usadas são: máxima verossimilhança, mínima discrepância, abordagem Bayesiana e da validação cruzada generalizada (do inglês *generalized cross validation (GCV)*).

Para a aplicação da técnica RPT, optou-se pela determinação do multiplicador de Lagrange γ pelo método de validação cruzada generalizada por necessitar de um menor número de suposições (MÜLLER et al., 1999). Na Tabela 3 estão listados alguns autores que utilizaram esse método para a obtenção de γ em estudos com coeficientes ópticos.

Tabela 3 – Trabalhos que usaram o método de validação cruzada generalizada

Autores	Estudos
Wolfenbarger et al. (1990)	Inversion of aerosol size distribution data
Amato et al. (1995)	Objective algorithms for the aerosol problem
Müller et al. (1999)	Microphysical Particle Parameters from Extinction and Backscatter Lidar Data by Inversion with Regularization: Theory

b) Método de validação cruzada

Segundo Müller (1999) o método GCV é o único que leva em consideração o comportamento do modelo a partir dos dados de entrada. Além de não necessitar de uma estimativa *a priori* de erros, como no método de mínima ou máxima discrepância, nem de uma suposição *a priori* sobre a solução e/ou dos erros estatísticos e sistemáticos como na abordagem *Bayesiana*.

Na aplicação do método GCV a cada *loop* k do algoritmo é ocultado um dos dados de entrada e testada uma faixa de valores de γ . Por exemplo, neste algoritmo são usados 5 coeficientes ($3\beta + 2\alpha$); a cada *loop* k será ocultado um dos coeficientes e realizado o cálculo de $[Av_k(\gamma)]_k$ para cada γ . Quando se determina o valor de γ adequadamente para um conjunto k , $[Av_k(\gamma)]_k$ deve predizer aproximadamente o valor de g_k . A função objetivo a ser minimizada é:

$$P_{GCV}(\gamma) = \frac{\frac{1}{k} \|[I - M^*]g\|^2}{\left\{ \frac{1}{k} \text{traço}[I - M^*(\gamma)] \right\}^2} \quad (59)$$

Na qual I é a matriz identidade e a matriz M está relacionada diretamente com a matriz de Kernel A , como apresentado na Equação 60:

$$M^*(\gamma) = A(A^T A + \gamma H)^{-1} A^T \quad (60)$$

A Figura 18 ilustra o fluxograma do algoritmo da técnica de RPT aplicada neste trabalho.

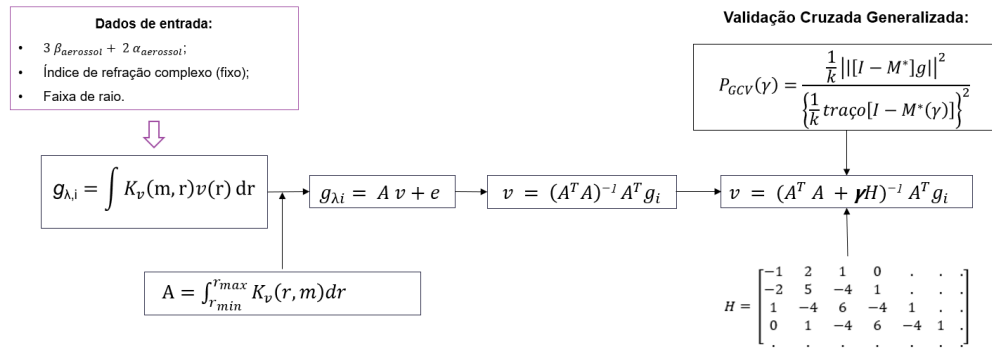


Figura 18 - Algoritmo da técnica de Regularização Phillips-Twomey. Fonte: Própria autoria, 2020.

Para o cálculo do presente algoritmo (Figura 18) são usados como dados de entrada os coeficientes ópticos $3\beta + 2\alpha$, o índice de refração complexo fixado e uma faixa de raios aerodinâmicos para as partículas de aerossóis.

Primeiramente foram determinadas as eficiências de retroespalhamento Q_{esp} e extinção Q_{ext} que compõem o cálculo da função de Kernel usando a teoria de Mie. Em seguida, a matriz óptica A foi criada a partir da descrição de Eliçabe et al. (1990).

Após esta etapa, monta-se a matriz de regularização H e uma rotina para a técnica da validação cruzada generalizada (GCV), com a qual se selecionou o valor de γ que resultou em um menor parâmetro P_{GVC} , obtendo, assim, uma função v mais suavizada.

7.4.2. Técnica de inversão - Regularização de Veselovskii - VSK

O método de regularização proposto por Veselovskii et al. (2002) baseia-se em uma distribuição volumétrica de tamanho de aerossóis (DTA) modelada por aproximações de somas de triângulos isósceles com alturas ponderadas. Nesse método são determinados vetores pesos w_j que definirão as alturas para cada triângulo, dando o formato à moda da DTA.

Partindo-se da função de *Fredholm* de primeira ordem (Equação 41) apresentada na seção 6.6,

$$g_j(\lambda_i) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} K_j(m, r, \lambda_i) v(r) dr + e_j^{exp}$$

a distribuição volumétrica $v(r)$ é aproximada por uma combinação linear das funções base B-spline $B_p(r)$ e dos pesos w_p ,

$$v(r) = \sum_p B_p(r) + w_p + e^{num}(r) \quad (61)$$

Dentro do somatório é incluído um resíduo numérico e^{num} causado pela aproximação da função. $B_j(R)$ é a função base B-spline, a qual assume a forma triangular, e w_p representa os vetores pesos que irão ponderar as alturas dos triângulos.

A função base *B-spline* segue as seguintes condições:

$$B_p(r) \begin{cases} 0, & r < R_{p-1} \\ 1 - \frac{R_p - r}{R_p - R_{p-1}}, & R_{p-1} < r \leq R_p \\ 1 - \frac{r - R_p}{R_{p+1} - r}, & R_p < r \leq R_{p+1} \\ 0, & r > R_{p+1} \end{cases} \quad p = 1, 2, \dots, t$$

em que t representa o número de funções *B-spline* (números de triângulos). Müller et al. (1999) indica que esse valor sempre deve coincidir com os números de coeficientes ópticos sendo usados. Sendo assim, para este estudo, $n = 5$. Os pontos R_p são separados igualmente dentro de um intervalo $[R_{p=0}, R_{(p=n+1)}]$.

O vetor peso w_p é determinado inserindo a Equação 61 na 41, obtendo-se a seguinte combinação linear,

$$g_j(\lambda_i, m) = \sum_p A_{pj}(m) w_p + e_j \quad (62)$$

O erro e_j é a soma de erros experimentais e numéricos, $e_j = e_j^{exp} + e_j^{num}$. A matriz óptica A_{pj} é determinada a partir do produto das funções de Kernel $K_j(m, r, \lambda)$ com as funções base B-spline $B_p(r)$,

$$A_{pj}(m) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} K_j(m, r, \lambda_i) B_p(r) dr \quad (63)$$

Neste método, a integral da função A_{pj} foi aproximada pela regra do trapézio. Reescrevendo a Equação 62 em forma de vetor-matriz, tem-se:

$$g = A w + e \quad (64)$$

em que a matriz $A = [A_{pj}]$ e seus elementos são obtidos pela Equação 62. Para o cálculo do vetor w , é usada a seguinte equação,

$$w = A^{-1}g + e^* \quad (65)$$

Em que $e^* = -A^{-1}e$ e A^{-1} é a inversa da matriz óptica A. Contudo, como descrito na seção 6.4, a matriz A é mal condicionada, tornando a Equação 65 instável. Sendo assim, é aplicada a regularização para tornar o resultado do vetor peso mais suave, como apresentado na Equação 66.

$$w = (A^T A + \gamma H)^{-1} A^T g \quad (66)$$

A matriz H é deduzida como apresentado na seção 7.4.1, porém para esse algoritmo sua dimensão depende do número de funções base *B-spline*, ou seja, $n \times n$. O multiplicador de Lagrange γ é obtido através da seguinte equação,

$$\gamma = 2^a 10^{-b} \quad (67)$$

O parâmetro $a = 1, 2, \dots, 25$ e b varia entre 20 e 28.

A escolha do multiplicador de Lagrange γ no método de Veselovskii et al. (2002) é realizada a partir do princípio da mínima discrepância g , definida na Equação 68, por usar critérios mais simples para sua execução. Porém, aplicando a mínima discrepância g é necessário saber *a priori* o erro esperado nos dados. Senão, tem-se a menor discrepância para $\gamma \rightarrow 0$ fazendo com que a função w oscile para $\gamma = [-\infty, +\infty]$. Mas segundo Veselovskii et al. (2002) para o estudo da *DTA*, este método pode ser alterado, aplicando a seguinte condição: as soluções $v(r)$ devem ser sempre positivas. Calcula-se a mínima discrepância g através da seguinte equação,

$$g \equiv \frac{1}{n} \sum_i \frac{\|g_i - A|v|\|}{g_i} \quad (68)$$

Em que a função v permanece em módulo para ser sempre positiva.

Então, cada conjunto do intervalo de R_0 , R_{n+1} e γ terá uma curva da DTA , ou seja, para cada solução obtém-se uma função $v(r)$ (Equação 61). Neste método, a DTA final é a média de todas as funções $v(r)$ que possuem uma mínima discrepância menor que $2 \cdot 10^{-10}$, como apresentado pela Equação (69).

$$DTA(r) = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N v(r) \quad (69)$$

Na qual N é o número de funções $v(r)$ obtidas com as mínimas discrepâncias selecionadas.

O algoritmo desenvolvido para a aplicação da técnica de Veselovskii é apresentado na Figura 19.

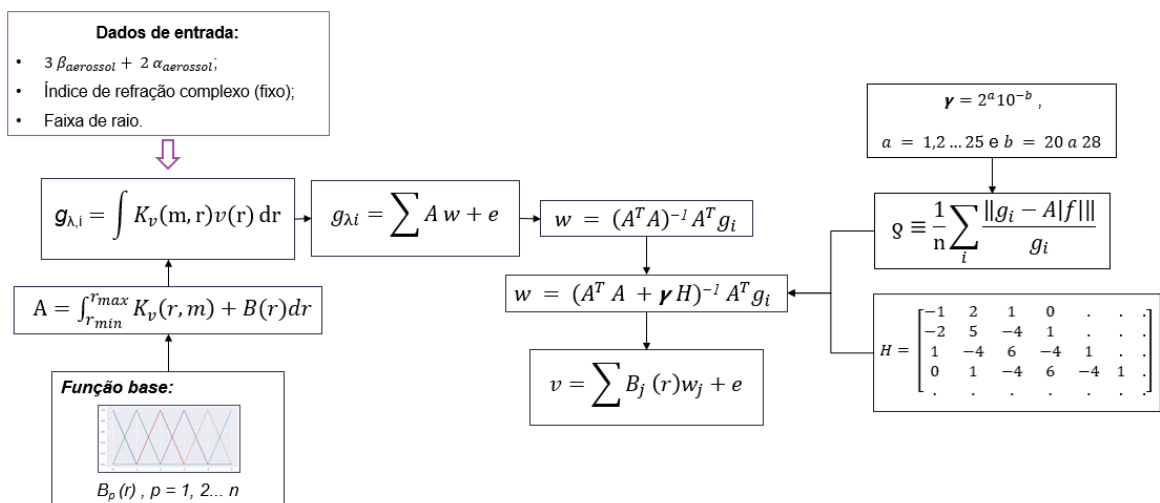


Figura 19- Algoritmo da técnica de Regularização Veselovskii. Fonte: Própria autoria, 2020

Como no algoritmo anterior, foram determinadas primeiramente as eficiências Q_{esp} e Q_{ext} que compõem o cálculo da função de Kernel usando a teoria de Mie. Após isso, criou-se uma rotina para a função da B-spline com a mesma quantidade de triângulos que os números de dados de entradas $g(\lambda)$. Fez-se então a aproximação da matriz óptica A (Equação 63) composta pelo produto da função Kernel e B -spline.

Foram criadas a matriz de regularização H e uma rotina para a técnica da mínima discrepância, usando o mesmo conceito do método de RPT, selecionando γ que geraram menores valores para g . E assim, determinaram-se as médias das melhores funções v , gerando uma DTA suavizada.

7.4.3. Método Direto – Busca Direta por Otimização de Parâmetro - BDO

O método proposto neste algoritmo difere dos anteriores pelo fato de usar um método de otimização. Primeiramente, usou-se um *software* aberto denominado de CasADi¹², que contém alguns pacotes de otimização linear e não linear, e podem ser introduzidos como uma ferramenta no *software Matlab*.

Nesse algoritmo usou-se um pacote de otimização não linear NLP – IPOPT – (abreviação para o termo em inglês Interior Point OPTimizer – Método do Ponto Interior), cuja descrição matemática é detalhada por Wächter (2002 e 2009). Mas resumidamente, o método fornece uma série de pontos interiores $\{x^n\}_{n \in \mathbb{N}}$ contidos em uma região de confiança e, com uma estimativa inicial para os parâmetros (x_0) , se inicia uma busca de valores, assim, a cada iteração a função objetivo $f(x)$ é minimizada (CELIS, 2018; WÄCHTER, 2009). Seja o problema

$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) & (70) \\ \text{s. a} \quad & h^l \leq h(x) \leq h^s \\ & x^l \leq x \leq x^s \end{aligned}$$

Onde $x \in \mathbb{R}^n$ é o parâmetro que se deseja otimizar, o qual possui um limite inferior (x^l) e superior (x^s) . O termo $f(x)$ é a função objetivo e $h(x)$ são as restrições do problema. Segundo Wächter (2009), as funções $f(x)$ e $h(x)$ podem ser lineares ou não lineares e convexas ou não convexas. O algoritmo encontra um mínimo local do problema e, quando o problema for não-convexo, pode-se apresentar muitos pontos estacionários com diferentes valores para a função objetivo, e isso irá depender do ponto de partida, ou seja, dos valores das estimativas iniciais para os parâmetros e das escolhas algorítmicas para as quais o método converge (WÄCHTER, 2009),.

¹² Referência: ANDERSSON et al., 2019

Para o presente trabalho, a partir de uma distribuição volumétrica lognormal (Equação. 71), a qual o algoritmo buscou os valores dos parâmetros, para que assim, a função objetivo F_{min} fosse minimizada (Equação 72).

$$\frac{\partial v_{BDO}(r)}{\partial \ln r} = \frac{N_t}{\sqrt{2\pi} \ln \sigma_{BDO}} \exp \left[-0,5 \frac{(\ln r - \ln \mu_{BDO})^2}{\ln \sigma_{BDO}^2} \right] \quad (71)$$

em que $v_{BDO}(r)$ indica a distribuição volumétrica de tamanho de aerossol (DTA), no caso, é o termo de interesse. N_t é o número total de partículas. E os termos σ e μ , são o desvio – padrão e a média dos valores logarítmicos, respectivamente. Os valores para σ e μ foram os parâmetros de busca para a minimização da função objetivo (Equação 72).

$$F_{min} = (g_{lidar} - g_{BDO})^2 \quad (72)$$

em que o termo g_{lidar} representa os coeficientes ópticos experimentais do lidar ($3\beta_{lidar} + 2\alpha_{lidar}$) e g_{BDO} representa os coeficientes ópticos “originais” obtidos pelo método direto (Equação 73),

$$g_{BDO}(\lambda_i) = \int_{r_{min}}^{r_{max}} K_i(m, r, \lambda_i) v_{BDO}(r) dr \quad (73)$$

A função de Kernel, K_i , é obtida a partir da teoria de Mie, como nos outros métodos apresentados. E o termo da função distribuição volumétrica de tamanho de aerossol, v_{BDO} , é calculado pela Equação 71.

Após encontrar os parâmetros ótimos da Equação 71, que minimizam a função objetivo (Equação 72), esses valores são usados novamente em uma função de distribuição volumétrica lognormal. Assim, é estimada a distribuição volumétrica de tamanhos de aerossol do sistema lidar, v_{lidar} (Equação 74). A Figura 20 esquematiza o método apresentado nesta seção.

$$\frac{\partial v_{lidar}(r)}{\partial \ln r} = \frac{N_t}{\sqrt{2\pi} \ln \sigma_{ótimo}} \exp \left[-0,5 \frac{(\ln r - \ln \mu_{ótimo})^2}{\ln \sigma_{ótimo}^2} \right] \quad (74)$$

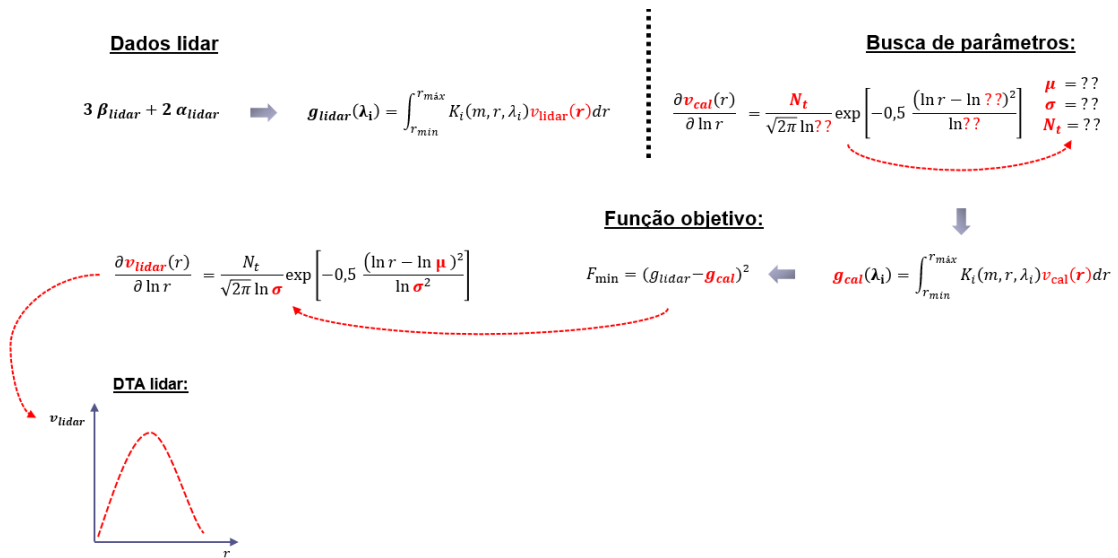


Figura 20 – Fluxograma do algoritmo de Busca direta por otimização de parâmetros. Fonte: Própria autoria, 2020.

Os valores usados em cada simulação como estimativas iniciais dos parâmetros, estão apresentados juntamente com os resultados das mesmas.

7.5. Critérios de Validação dos Algoritmos dos Métodos de Inversão

7.5.1. Validação com dados simulados

Nesta etapa, foram simulados coeficientes ópticos a partir de funções distribuições lognormal monomodais e bimodais conhecidas (Equação 75).

$$\frac{\partial v_{\text{orig}}(r)}{\partial \ln r} = \sum_{j=1}^M \frac{N_{t,j}}{\sqrt{2\pi} \ln \sigma_{j,\text{orig}}} \exp \left[-0,5 \frac{(\ln r - \ln \mu_{j,\text{orig}})^2}{\ln^2 \sigma_{j,\text{orig}}} \right] \quad (75)$$

Em que $v_{\text{orig}}(r)$ indica a distribuição volumétrica de tamanho original simulada (DTA_{orig}). M é o número de modas, onde o índice $j = 1$ representa uma distribuição monomodal e $j = 2$ uma distribuição bimodal. O termo N_t é o número total de partículas. O desvio-padrão é σ_{orig} e a média μ_{orig} são valores conhecidos, que foram variados para que se pudessem realizar diferentes estudos de casos.

Com isso, diferentes distribuições monomodais e bimodais foram criadas, n_{orig} , e a partir delas foram calculados os coeficientes ópticos “originais”, $\alpha_{orig}(\lambda)$ e $\beta_{orig}(\lambda)$ (Equações 76 e 77, respectivamente).

$$\alpha_{orig}(\lambda_i) = \int_{r_{min}}^{r_{máx}} K_i(m, r, \lambda_i) v_{orig}(r) dr \quad (76)$$

$$\beta_{orig}(\lambda_i) = \int_{r_{min}}^{r_{máx}} K_i(m, r, \lambda_i) v_{orig}(r) dr \quad (77)$$

As funções de Kernel $K_i(m, r, \lambda_i)$ foram calculadas a partir da teoria de Mie para partículas consideradas esféricas (BOHREN e HUFFMAN, 1983), o subscrito i representa cada comprimento de onda usado no sistema lidar ($\lambda = 355, 532$ e 1064 nm). O índice de refração complexo, m , foi fixado em $1,55 + 0,001i$, esse valor foi selecionado a partir de um dia de medida da AERONET (28/05/2018 às 18:06 UTC).

Assim, esses coeficientes ópticos “originais” foram usados como parâmetros de entrada nos algoritmos desenvolvidos para os métodos de regularização Phillip-Twomey (RPT), regularização Veselovskii (VSK) e de busca direta por otimização (BDO). As distribuições de tamanho calculadas, v_{cal} foram comparadas com as que deram origem a esses coeficientes ópticos.

A fim de verificar possíveis erros numéricos nos cálculos dos algoritmos, com as distribuições de tamanho calculadas pelos métodos, v_{cal} , recalcularam-se os coeficientes ópticos, α_{cal} e β_{cal} (Equações 78 e 79, respectivamente).

$$\alpha_{cal}(\lambda_i) = \int_{r_{min}}^{r_{máx}} K_i(m, r, \lambda_i) v_{cal}(r) dr \quad (78)$$

$$\beta_{cal}(\lambda_i) = \int_{r_{min}}^{r_{máx}} K_i(m, r, \lambda_i) v_{cal}(r) dr \quad (79)$$

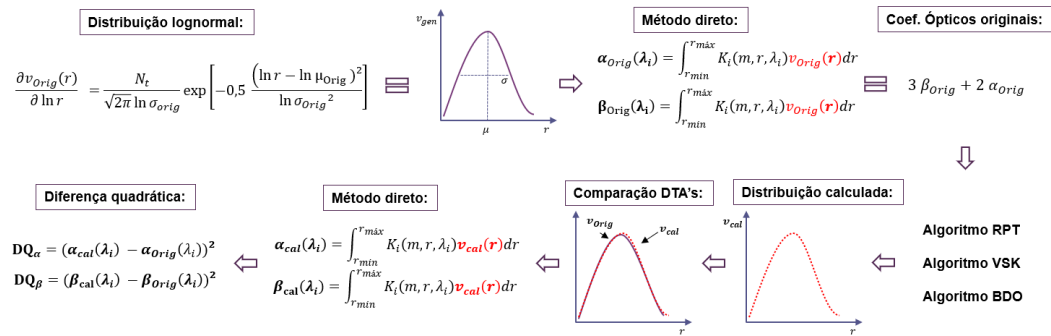
Com isso, foi determinada a distância quadrática (Equações 80 e 81) entre os coeficientes ópticos gerados pelas distribuições v_{orig} e v_{cal} .

$$DQ_{\alpha} = (\alpha_{cal,i} - \alpha_{origt,i})^2 \quad (80)$$

$$DQ_{\beta} = (\beta_{cal,i} - \beta_{orig,i})^2 \quad (81)$$

Este método de validação está esquematizado no fluxograma da Figura 21.

Figura 21 - fluxograma do método de validação dos algoritmos para estimar a DTA.



Fonte: Própria autoria, 2020

Além disso, com o intuito de verificar a sensibilidade dos algoritmos diante de possíveis erros presentes nos coeficientes ópticos experimentais, foram inseridos erros randômicos nos coeficientes ópticos “originais”, $\alpha_{orig}(\lambda_i)$ e $\beta_{orig}(\lambda_i)$.

7.6. Aplicação dos Coeficientes Ópticos Experimentais do Sistema Lidar – Algoritmos de Inversão

Nesta etapa, foram usados os coeficientes ópticos obtidos a partir das medidas experimentais do sistema lidar. Como método de validação das distribuições de tamanho de aerossóis resultantes dos algoritmos desenvolvidos neste trabalho, se comparou as mesmas com as distribuições de tamanho de aerossóis da rede AERONET (AERosol RobotiC NETwork) normalizada, a qual utiliza em seu algoritmo de inversão medidas diárias por fotômetros. O fotômetro utilizado está localizado a menos de 400 m do sistema lidar do CLA-IPEN (no Instituto de Física da Universidade de São Paulo) e possui um raio de alcance de aproximadamente de 100 km.

Para uma possível comparação, os seguintes critérios foram adotados:

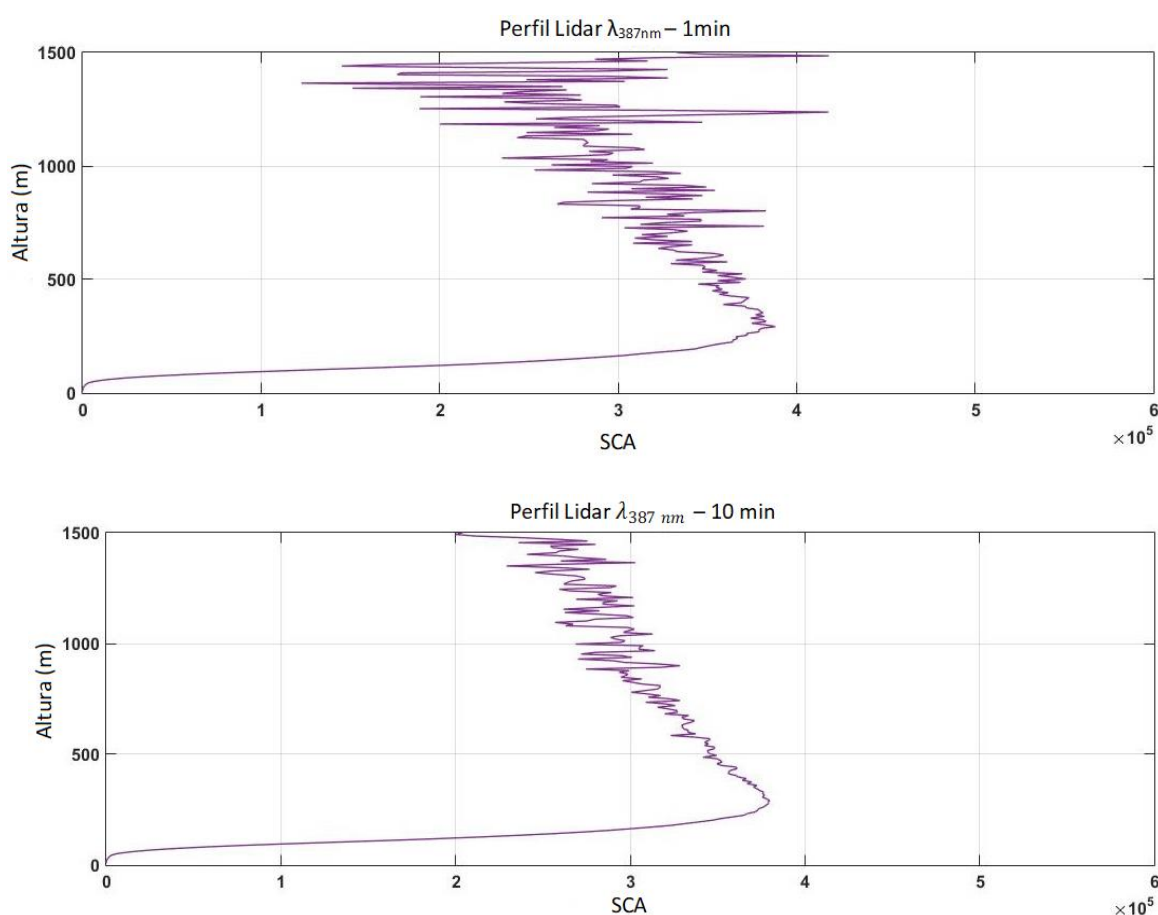
- a) Foram selecionadas datas de medição do lidar, em que a distribuição de aerossóis na atmosfera era a mais homogênea possível;
- b) Foram selecionadas datas de medição nas quais havia medições concomitantes (dia e horário UTC) com o fotômetro solar da rede AERONET localizado no Instituto de Física da Universidade de São Paulo;
- c) Foram selecionadas datas de medição nas quais, segundo o sistema da rede AERONET, o índice de refração complexo de aerossol fosse o mais constante possível em todos os comprimentos de onda, λ ;
- d) A faixa de raio usada como parâmetro de entrada foi equivalente à faixa da AERONET ($r_{min} = 0,05 \mu m$ e $r_{max} = 15 \mu m$);
- e) As distribuições de tamanho de aerossol da AERONET e as estimadas pelos algoritmos foram normalizadas;
- f) como a distribuição de aerossol da AERONET é uma média em toda a coluna atmosférica, foi usada uma média dos coeficientes ópticos g_{lidar} no intervalo em que é visível a camada limite de partículas de aerossol na atmosfera (possível visualização a partir do *Quick look* do sinal corrigido do lidar).

Assim, foram escolhidas as seguintes datas para estudo de casos: 28 de maio de 2018 e 25 de junho de 2018.

7.7. Aplicação da Técnica de Redes Neurais Artificiais

Na técnica de Rede Neural Artificial (RNA), os sinais de retroespalhamento dos totais nos comprimentos de onda: 355, 532, 1064, 387 e 530 do sistema lidar, foram corrigidos pelo quadrado da distância (z^2) (entre o alvo e o laser) e utilizados como entradas dos modelos.

O sinal Raman é descrito pela interação entre as moléculas de nitrogênio (N_2) presentes na atmosfera e a luz do laser do lidar (ANSMANN E MÜLLER, 2005). E quando as medidas do sistema lidar são diurnas, a intensidade de luz retroespalhada das moléculas é baixa em relação à intensidade de luz solar. Devido a isso, os sinais Raman contêm mais ruídos que os canais elásticos (KOVALEV e EICHINGER, 2004). Por esse fato, ao processar o sinal eletrônico de retroespalhamento do lidar, a fim de diminuir esses ruídos externos nos sinais Raman, foi realizada uma média temporal das medidas. Quanto maior for o intervalo de tempo para a média temporal, mais suave se torna o sinal. A Figura 22 apresenta o perfil do sinal do canal Raman 387 nm do sistema lidar para três médias temporais da medida.



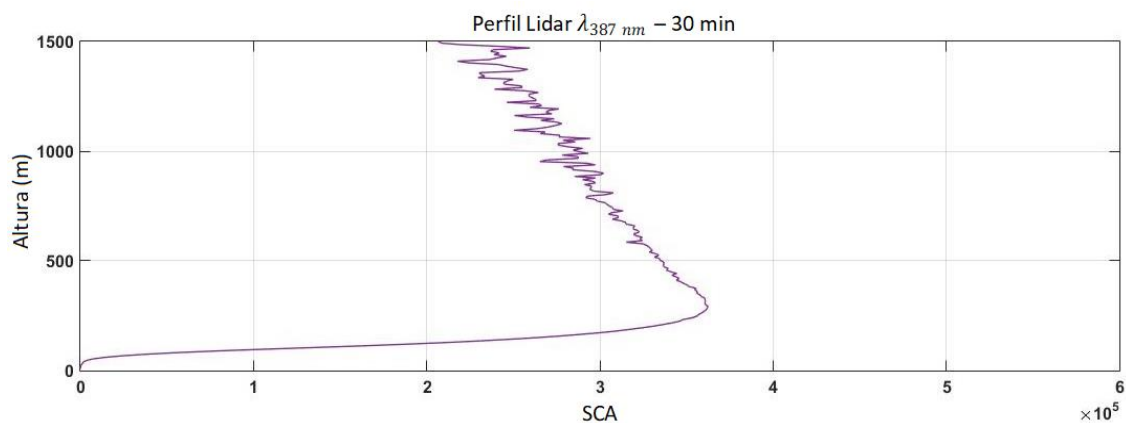
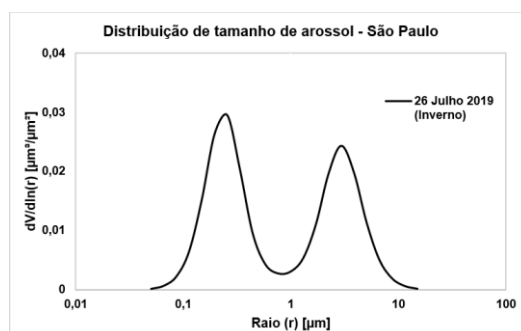


Figura 22 - Perfil do sinal corrigido do canal 387 nm do sistema lidar em relação à altura. Legenda: Sinal corrigido com a altura (SCA). Fonte: Própria autoria, 2020

Para dos dados experimentais do lidar, foram selecionadas medidas concomitantes com a rede AERONET em um período de março de 2018 a fevereiro de 2020. Após a correção com a distância ao quadrado e o processamento dos sinais com uma média temporal de 30 min, selecionaram-se sinais retroespalhados de quatro diferentes altitudes : 300, 550, 800 e 1300 m (em relação ao lidar) para cada comprimento de onda, os quais foram usados como dados de entradas da RNA.

Os dados do lidar usados como entrada, por sua vez, foram correlacionados com seis parâmetros calculados a partir das distribuições de tamanho de aerossol da rede AERONET, que são tipicamente bimodais para grandes metrópoles como São Paulo, devido à presença de partículas de diferentes naturezas na atmosfera. As Figuras 23A, 23B e 23C ilustram as distribuições de tamanho de aerossóis no dia 26 de julho de 2019 em São Paulo, Nova Iorque e Pequim, respectivamente, nas quais todas as DTA apresentadas são bimodais.



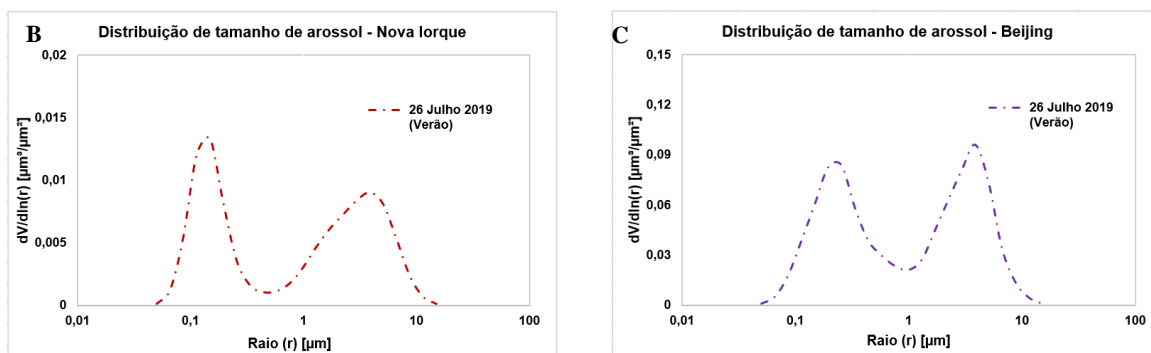


Figura 23 – Distribuições de tamanho de aerossol de três grandes metrópoles mundiais. Fonte: Dados disponíveis em <https://aeronet.gsfc.nasa.gov>.

Sendo assim, os seis parâmetros usados como dados de saída da RNA foram: desvio padrão da primeira moda (σ_1), desvio padrão da segunda moda (σ_2), raio médio da primeira moda (μ_1), raio médio da segunda moda (μ_2), altura da primeira moda (H_1) e altura da segunda moda (H_2).

A Figura 24, apresenta de um modo sintetizado o método proposto para o ajuste de modelos de RNA.

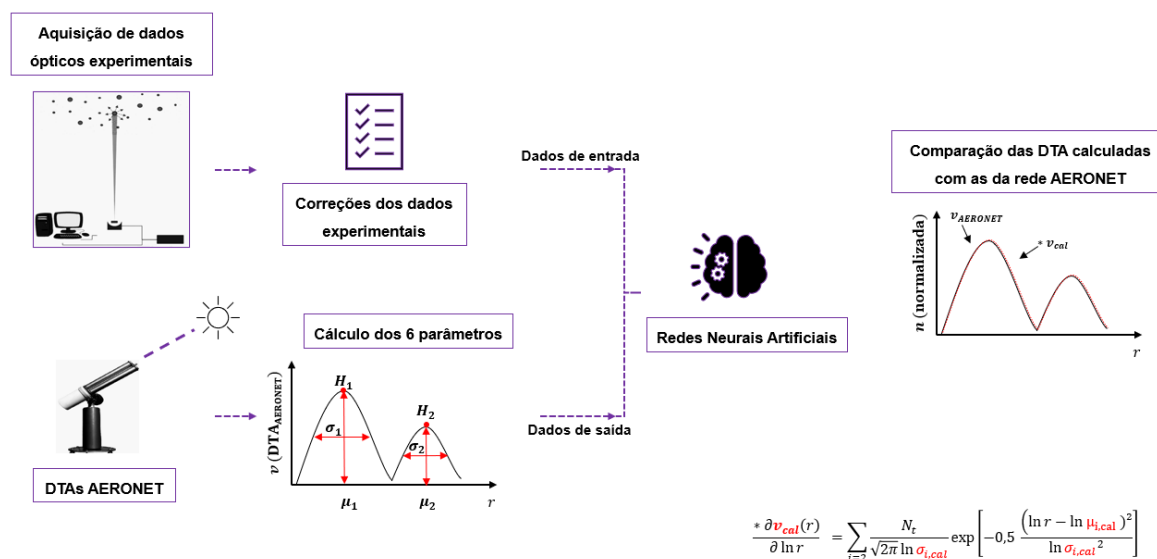


Figura 24 - Fluxograma da aplicação da técnica de Redes Neurais Artificiais para a validação dos dados experimentais do sistema lidar. Fonte: Própria autoria, 2020

8. ANÁLISE DOS RESULTADOS

8.2. Validação dos Algoritmos - Estimar a Distribuição volumétrica de tamanho de Aerossol (DTA)

Nesta seção são apresentados e analisados os resultados dos métodos de validações dos algoritmos usados para estimar a distribuição volumétrica de tamanho de aerossol, DTA, como descrito na seção 7.4.

Com as distribuições de tamanho, DTA originais simuladas e estimadas, para os algoritmos de regularização foram avaliados os seguintes critérios entre elas: comportamento das modas e comparação do raio médio, μ , e desvio padrão, σ . Além disso, foi determinada a distância quadrática, DQ, e o erro percentual, %Erro, entre os coeficientes ópticos gerados pelas distribuições de tamanho originais simuladas e as estimadas pelos algoritmos desenvolvidos neste trabalho. Para o algoritmo de busca direta por otimização, foi verificado o valor da função objetivo, composta pela distância quadrática entre os coeficientes ópticos calculados pelo algoritmo e a partir de dados de medições.

8.2.1. Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 1

Nesta seção são apresentados os resultados da validação de cada um dos algoritmos desenvolvidos neste trabalho para o estudo de caso 1. Para a simulação da distribuição volumétrica de tamanho “original” foram usados os seguintes parâmetros geométricos em uma função lognormal monomodal: faixa de raios na ordem de $10^{-1} \mu m$, com μ_{orig} e σ_{orig} iguais a $0,5 \mu m$ e $1,1 \mu m$.

Para o cálculo dos coeficientes ópticos simulados, foi usado um índice de refração complexo constante de $m = 1,55 + 0,001$ (inserido no cálculo das funções de kernel para cada comprimento de onda) e um passo de integração de 0,001 para o cálculo dos coeficientes ópticos.

I) Método de Regularização Phillips-Twomey (RPT)

O primeiro algoritmo avaliado para o estudo de caso 1 foi o algoritmo do método de regularização de Phillips-Twomey. A Figura 25 apresenta a comparação entre as distribuições de tamanho original simulada e a estimada pelo algoritmo RPT neste caso.

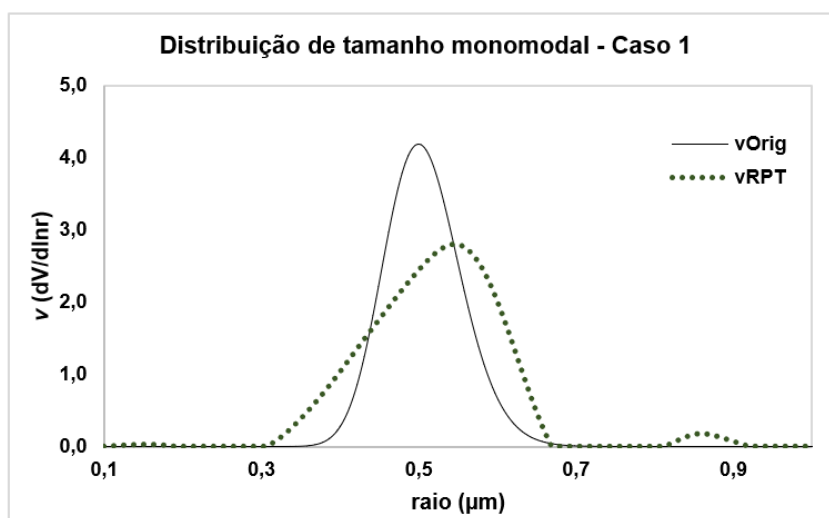


Figura 25 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de RPT - Caso 1.

Legenda: Fonte: Própria autoria, 2020.

Conforme a Figura 25, nota-se que o algoritmo teve dificuldade em estimar com precisão a distribuição volumétrica de tamanho original. Notam-se alguns problemas na estimativa da altura do pico (que foi inferior a DTA_{Orig}), além de deformações nas extremidades da distribuição. Devido a esses problemas, ao estimar a DTA_{Orig} , os parâmetros μ_{RPT} e σ_{RPT} foram equivalentes a $0,55 \mu m$ e $1,3 \mu m$, respectivamente. Contudo, ao verificar a distância quadrática e o erro percentual entres os g_{Orig} e g_{RPT} , notam-se valores próximos a zero (apresentados na Tabela 4, Equações 79 e 80).

Tabela 4 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 1 – Validação RPT

	g_{orig}	g_{RPT}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355\text{ nm}}$	3,555	3,558	$1,01 \cdot 10^{-05}$	0,089
$\beta_{532\text{ nm}}$	3,243	3,249	$3,30 \cdot 10^{-05}$	0,177
$\beta_{1064\text{ nm}}$	5,141	5,135	$3,21 \cdot 10^{-05}$	0,110
$\alpha_{355\text{ nm}}$	3,627	3,630	$9,76 \cdot 10^{-06}$	0,086
$\alpha_{532\text{ nm}}$	3,291	3,297	$3,26 \cdot 10^{-05}$	0,173

A distância quadrática (DQ) mede a distância entre duas observações ou grupos. E quando se têm valores próximos a zero, pode-se dizer que há uma maior similaridade entre as observações. Sendo assim, observando os valores da Tabela 4, pode-se dizer que há uma similaridade entre os coeficientes ópticos originais (g_{orig}) e os gerados pelo algoritmo de RPT (g_{RPT}). Tal similaridade gerou um %Erro aproximadamente entre 0,09 a 0,18%, ou seja, baixo.

II) Método de Regularização de Veselovskii (VSK)

O segundo algoritmo avaliado com o estudo de caso 1 foi o método de regularização de Veselovskii. A Figura 26 ilustra o resultado da DTA_{VSK} e sua comparação com a DTA_{orig} .

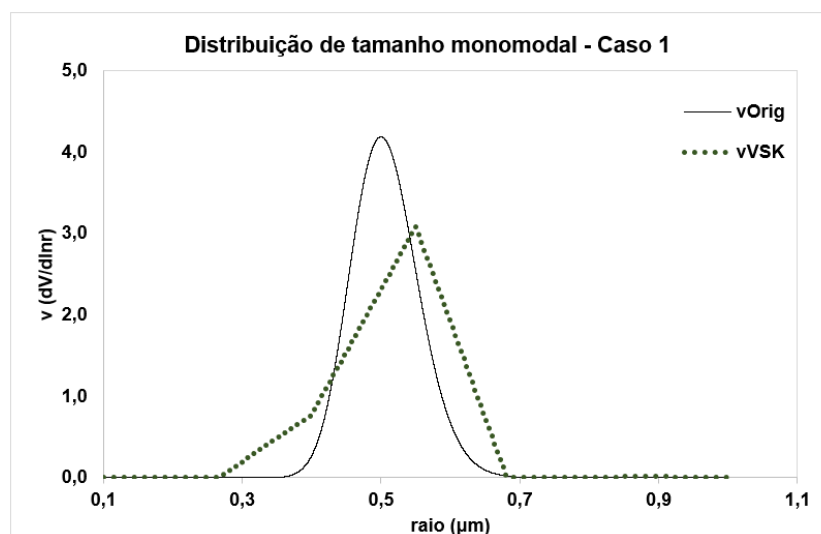


Figura 26 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de VSK - Caso 1. Fonte: Própria autoria, 2020.

No caso 1 ocorreu um desvio no eixo do raio, de modo que o raio médio (μ_{VSK}) e desvio padrão (σ_{VSK}) da distribuição, apresentam valores de 0,54 μm e 1,22 μm como ilustra Figura 26. Observa-se também um problema no valor da moda da DTA_{VSK} , pois o algoritmo não conseguiu estimar com precisão esse parâmetro (obtendo um moda inferior ao da DTA_{Orig}). O formato triangular da resposta do algoritmo do método de VSK é devido a aproximação da DTA por triângulos isósceles.

A Tabela 5 apresenta os resultados da distância quadrática (DQ) e o erro percentual (%Erro) entre os coeficientes ópticos calculados pela distribuição original (g_{Orig}) e a partir da distribuição estimada pelo algoritmo de VSK (g_{VSK}).

Tabela 5 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 1 – Validação VSK

	g_{Orig}	g_{VSK}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355\text{ nm}}$	3,555	3,833	0,077	7,81
$\beta_{532\text{ nm}}$	3,243	3,563	0,102	9,86
$\beta_{1064\text{ nm}}$	5,141	5,571	0,184	8,36
$\alpha_{355\text{ nm}}$	3,627	3,913	0,081	7,88
$\alpha_{532\text{ nm}}$	3,291	3,617	0,106	9,90

Conforme a Tabela 5, a DQ apresentou uma ordem de grandeza entre 10^{-2} e 10^{-1} . Sendo assim, pode-se dizer que há uma similaridade entre os coeficientes ópticos simulados e os gerados pelo algoritmo de VSK. Tal similaridade gerou um %Erro entre 7,2 e 9%.

Comparando os resultados dos dois algoritmos apresentados, nota-se que, visualmente, a DTA_{VSK} aparenta ser mais semelhante à DTA_{Orig} . Os valores da DQ e %Erro do método de RPT são menores aos que foram gerados pelo método de VSK.

III) Método de Busca Direta por Otimização (BDO)

Para a validação do método de busca direta do caso 1, foi usada uma estimativa inicial dos parâmetros $\mu_0 = 0,0\ \mu\text{m}$, $\sigma_0 = 1,1\ \mu\text{m}$. A faixa de busca para cada parâmetro foi de 0 a 10. A Figura 27 ilustra o resultado da distribuição estimada pelo método BDO e a comparação da mesma com a DTA_{Orig} que foi simulada para o caso 1.

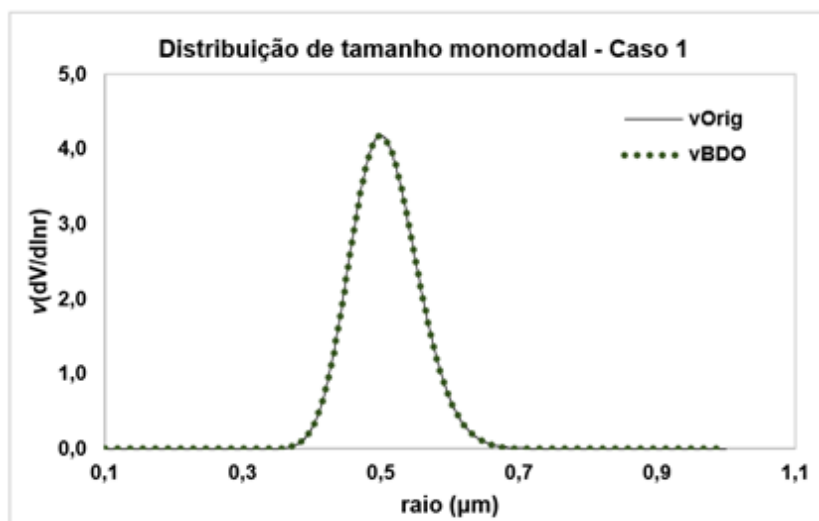


Figura 27 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de BDO - Caso 1. Fonte: Própria autoria, 2020.

Como pode-se observar na Figura 27, o algoritmo BDO estimou a DTA_{Orig} sem deformação na moda ou deslocamento no eixo do raio (como visto nos métodos de RPT e VSK). Na busca dos parâmetros geométricos ótimos que minimizam a função objetivo F_{min} (Tabela 6 – Valores da F_{min} e dos coeficientes ópticos do caso 1 – Validação BDO. Tabela 6), o algoritmo BDO detectou os mesmos valores usados para a simulação da distribuição volumétrica de tamanho original: $\mu_{BDO} = 0,5 \mu m$ e $\sigma_{BDO} = 1,1 \mu m$.

Tabela 6 – Valores da F_{min} e dos coeficientes ópticos do caso 1 – Validação BDO.

	g_{Orig}	g_{BDO}	F_{min}
$\beta_{355 nm}$	3,555	3,555	
$\beta_{532 nm}$	3,243	3,243	
$\beta_{1064 nm}$	5,141	5,141	$2,28 \cdot 10^{-18}$
$\alpha_{355 nm}$	3,627	3,627	
$\alpha_{532 nm}$	3,291	3,291	

Como se observa na Tabela 6, os valores dos coeficientes ópticos calculados a partir da DT_{BDO} , geraram um mínimo de $2,28 \cdot 10^{-18}$ para a função objetivo, F_{min} . Ou seja, o algoritmo foi eficiente ao estimar a DTA_{Orig} proposta.

Ao comparar os resultados obtidos pelo algoritmo do método de BDO com o de RPT e de VSK, pode se dizer que o algoritmo obteve uma maior eficiência que os demais, pois, além de estimar com precisão a DTA_{Orig} , apresentou valores similares entre g_{Orig} e g_{BDO} .

8.2.2. Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 2

Nesta seção são apresentados os resultados da validação de cada um dos algoritmos desenvolvidos neste trabalho para o estudo de caso 2. Na simulação da distribuição de tamanhos original foram usados os seguintes parâmetros em uma função lognormal monomodal: faixa de raio entre 0,5 e 1,5 μm , com desvio padrão $\sigma_{Orig} = 1,2 \mu m$ e média $\mu_{Orig} = 1,0 \mu m$. Como no caso 1, foi adotado um índice de refração complexo constante de $m = 1,55 + 0,001$ e um passo de integração de 0,001 para o cálculo dos coeficientes ópticos.

I) Método de Regularização Phillips-Twomey (RPT)

A Figura 28 mostra o resultado do algoritmo do método de RPT ao estimar a distribuição volumétrica de tamanho para o caso 2 e a comparação entre as DTAs.

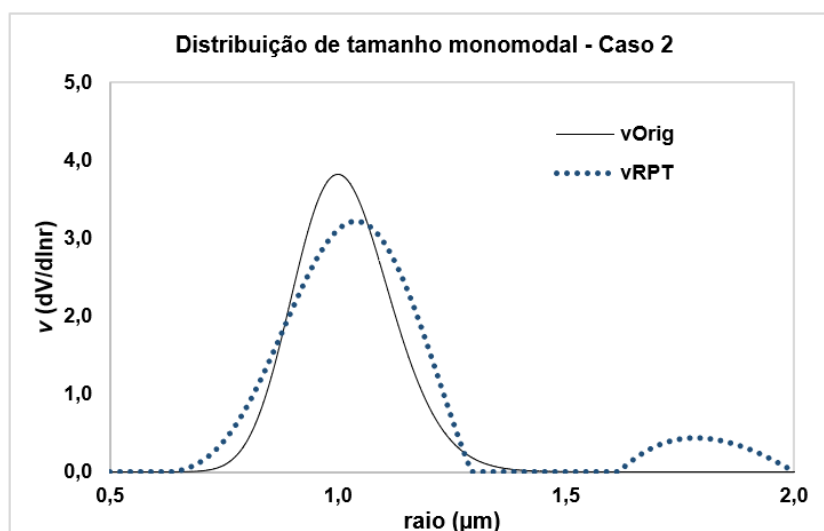


Figura 28 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de RPT - Caso 2. Fonte: Própria autoria, 2020.

Comparado com o estudo de caso 1, o algoritmo mostrou um melhor desempenho, como se nota na Figura 28. Como observado, houve um deslocamento no eixo do raio, com o raio médio igual a 1,25 μm e desvio padrão igual a 1,26 μm . A moda da DTA_{RPT} teve o pico abaixo da DTA_{Orig} . Além disso, verifica-se uma segunda moda na distribuição (a partir de $r = 1,65 \mu\text{m}$). Mas, mesmo apresentando esses problemas ao estimar a DTA, os valores da DQ e %Erro foram próximos a zero. Assim, houve similaridade entre g_{Orig} e g_{RPT} (Tabela 7).

Tabela 7 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 2 – Validação RPT

	g_{Orig}	g_{RPT}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355 \text{ nm}}$	6,898	6,897	$4,77 \cdot 10^{-07}$	0,010
$\beta_{532 \text{ nm}}$	7,041	7,042	$3,51 \cdot 10^{-07}$	0,008
$\beta_{1064 \text{ nm}}$	7,452	7,458	$3,86 \cdot 10^{-05}$	0,083
$\alpha_{355 \text{ nm}}$	7,168	7,167	$5,96 \cdot 10^{-07}$	0,011
$\alpha_{532 \text{ nm}}$	7,255	7,255	$2,67 \cdot 10^{-07}$	0,007

II) Método de Regularização de Veselovskii (VSK)

Conforme a Figura 29, verifica-se um desempenho melhor do algoritmo do método de VSK ao estimar a DTA_{Orig} do caso 2, quando comparado com o resultado do método de RPT.

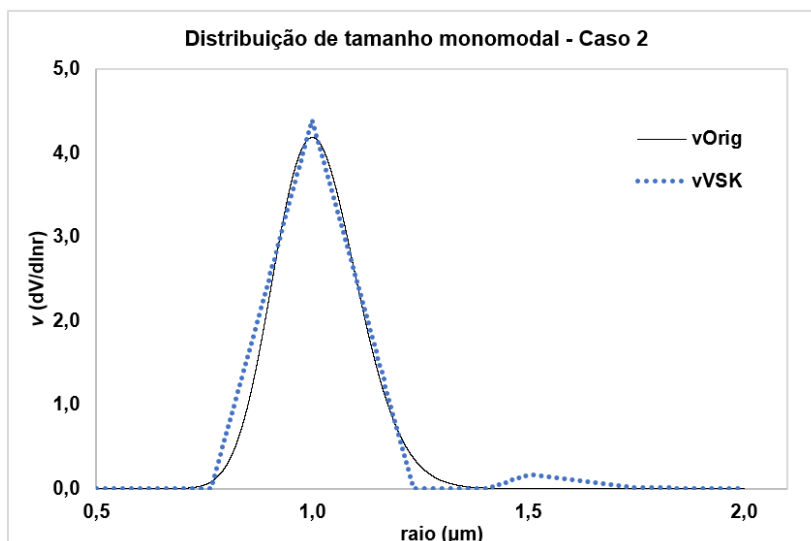


Figura 29 – Comparação entre a DTA original e a estimada pelo método de VSK - Caso 2. Fonte: Própria autoria, 2020.

Contudo, alguns pontos não se sobrepuseram aos da distribuição original. Uma das diferenças foi a moda, que está um pouco acima da original (como ilustrado na Figura 29).

Para o caso 2, os parâmetros μ_{VSK} e σ_{VSK} atingiram os mesmos valores que os usados para simular a DTA_{Orig} ($\mu_{Orig}=1,0 \mu m$ e $\sigma_{Orig} = 1,2 \mu m$). Porém, quando se observa a DQ e %Erro, nota-se que os valores são semelhantes aos obtidos no caso 1 (mesma ordem de grandeza), como apresentado na Tabela 8.

Tabela 8 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 2 – Validação VSK

	g_{Orig}	g_{VSK}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355 nm}$	6,898	7,334	0,189	6,32
$\beta_{532 nm}$	7,041	7,511	0,220	6,67
$\beta_{1064 nm}$	7,452	8,109	0,432	8,81
$\alpha_{355 nm}$	7,168	7,620	0,204	6,30
$\alpha_{532 nm}$	7,255	7,736	0,231	6,62

Analisando os valores exibidos na Tabela 8, verifica-se que se obteve similaridade entre os coeficientes ópticos g_{Orig} e g_{VSK} , mesmo apresentando %Erro superior a 6%.

III) Método de Busca Direta por Otimização (BDO)

O resultado do caso 2 é ilustrado na Figura 30, a qual apresenta a comparação entre a DTA_{Orig} simulada e a DTA_{BDO} . Usou-se a mesma estimativa inicial que no caso 1 para os parâmetros $\mu_0 = 0,0 \mu\text{m}$ e $\sigma_0 = 1,1 \mu\text{m}$. Onde a faixa de busca para cada foi de 0 a 10.

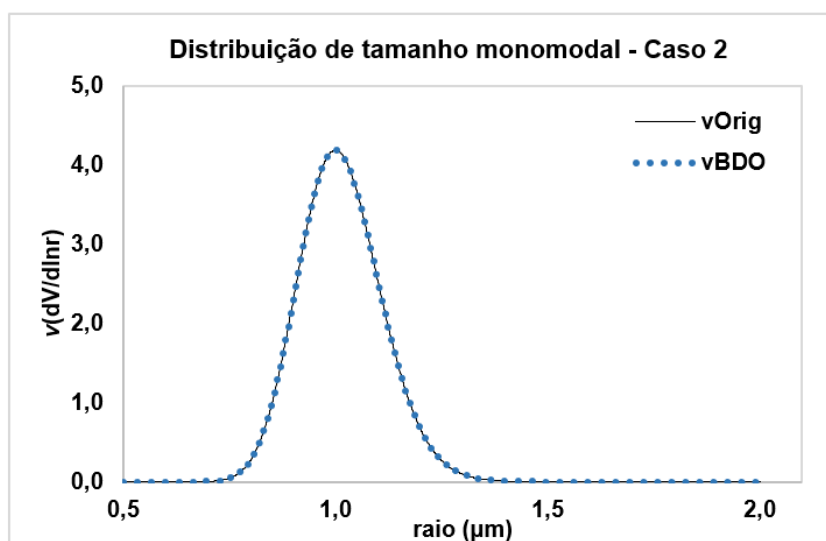


Figura 30 – Comparação entre a DT original e a estimada pelo método de BDO- Caso 2. Fonte: Própria autoria, 2020.

Conforme a Figura 30, o algoritmo de BDO mostrou bom resultado ao estimar a DTA_{Orig} simulada para o caso 2. Como no caso 1, o algoritmo também detectou os mesmos parâmetros geométricos usados na simulação da DTA_{Orig} : $\mu = 1,0 \mu\text{m}$ e $\sigma = 1,2 \mu\text{m}$. Para este caso, os coeficientes ópticos calculados a partir da DTA_{BDO} (g_{BDO}) resultaram em uma distância mínima quadrática de $1,62 \cdot 10^{-20}$ (Tabela 9).

Tabela 9 – Valores da F_{min} e dos coeficientes ópticos do caso 2 – Validação BDO.

	g_{Orig}	g_{BDO}	F_{min}
$\beta_{355\text{ nm}}$	6,898	6,898	
$\beta_{532\text{ nm}}$	7,041	7,041	
$\beta_{1064\text{ nm}}$	7,452	7,452	$1,62 \cdot 10^{-20}$
$\alpha_{355\text{ nm}}$	7,168	7,168	
$\alpha_{532\text{ nm}}$	7,255	7,255	

8.2.3. Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 3

Nesta seção são apresentados os resultados da validação de cada um dos algoritmos desenvolvidos neste trabalho para o estudo de caso 3. Na simulação das distribuições de tamanho de aerossol original foram usados os seguintes parâmetros em uma função lognormal monomodal: a faixa valores do raio de partículas foi maior que nos casos anteriores (de 0,01 a 5,0 μm) para a simulação da DTA original, desvio padrão $\sigma_{Orig} = 1,35\ \mu\text{m}$ e média $\mu_{Orig} = 2,3\ \mu\text{m}$. Adotou-se índice de refração complexo constante $m = 1,55 + 0,001i$ e passo de integração de 0,001 para o cálculo dos coeficientes ópticos.

I) Método de Regularização Phillips-Twomey (RPT)

A Figura 31 apresenta o resultado do estudo do caso 3 para a validação do algoritmo do método de regularização de Phillips-Twomey.

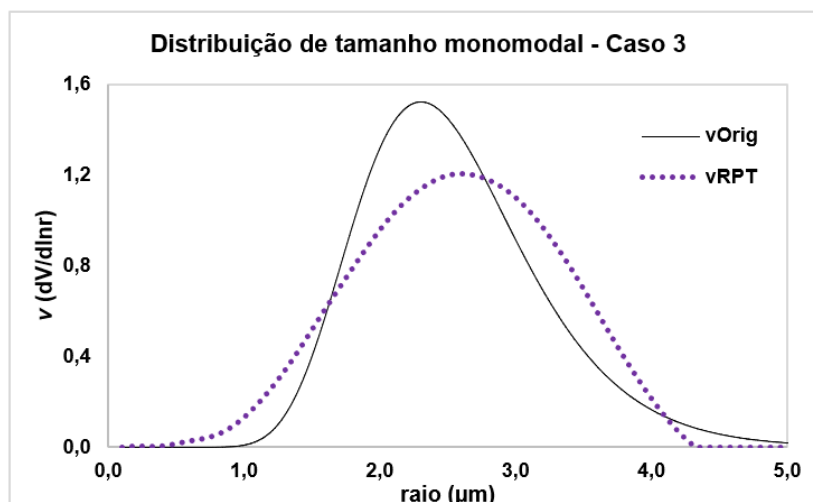


Figura 31 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de RPT - Caso 3. Fonte: Própria autoria, 2020.

Observa-se na Figura 31 que ocorre uma diferença na moda obtida pelo algoritmo RPT. Note-se uma curva de distribuição mais larga e mais baixa que a DTA_{Orig} , apresentando $\mu_{RPT} = 2,63 \mu m$ e $\sigma_{RPT} = 1,45 \mu m$.

Ao verificar os valores da DQ (Tabela 11), estes estão na ordem de grandeza de 10^{-1} entre g_{Orig} e g_{RPT} (mostrando similaridade). Porém, com %Erro em torno de 4,1%.

Tabela 10 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 3 – Validação RPT.

	g_{Orig}	g_{RPT}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355 nm}$	17,07	17,769	0,489	4,10
$\beta_{532 nm}$	17,89	18,621	0,535	4,09
$\beta_{1064 nm}$	19,48	20,239	0,577	3,90
$\alpha_{355 nm}$	18,51	19,297	0,619	4,25
$\alpha_{532 nm}$	18,95	19,747	0,636	4,21

II) Método de Regularização Veselovskii (VSK)

Conforme a Figura 32, o algoritmo VSK estimou a DTA_{Orig} monomodal um pouco melhor que o algoritmo de RPT. Porém, o raio médio foi um pouco deslocado para $\mu_{VSK} = 2,5 \mu m$ e o desvio padrão para $\sigma_{VSK} = 1,4 \mu m$.

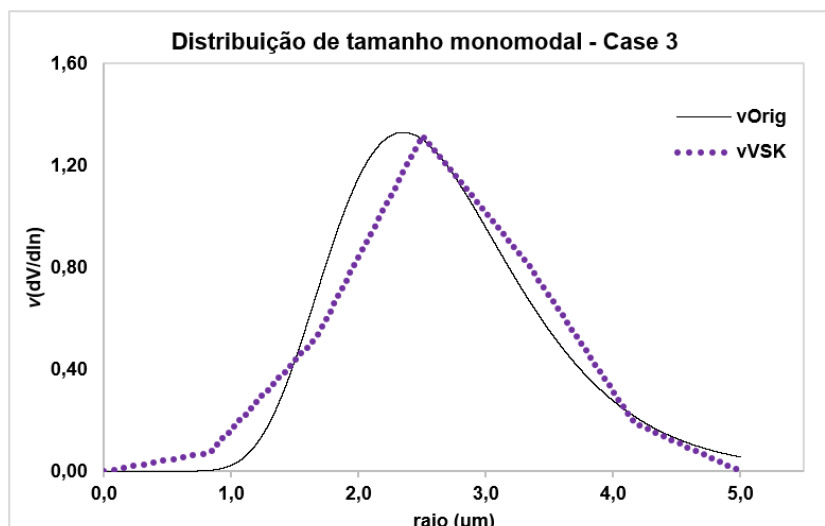


Figura 32 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de VSK - Caso 3. Fonte: Própria autoria, 2020.

A Tabela 11 apresenta os valores da distância quadrática e o erro percentual para este caso.

Tabela 11– Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 3 – Validação VSK.

	g_{orig}	g_{VSK}	DEQ	%Erro (%)
$\beta_{355\text{ nm}}$	17,07	17,07	$9,03 \cdot 10^{-23}$	$5,56 \cdot 10^{-11}$
$\beta_{532\text{ nm}}$	17,89	17,89	$1,51 \cdot 10^{-22}$	$6,86 \cdot 10^{-11}$
$\beta_{1064\text{ nm}}$	19,48	19,48	$1,44 \cdot 10^{-24}$	$6,16 \cdot 10^{-12}$
$\alpha_{355\text{ nm}}$	18,51	18,51	$1,66 \cdot 10^{-22}$	$6,96 \cdot 10^{-11}$
$\alpha_{532\text{ nm}}$	18,95	18,95	$2,82 \cdot 10^{-22}$	$8,86 \cdot 10^{-11}$

Analisando os valores exibidos na Tabela 11, verifica-se que os valores são inferiores quando comparados com os dois casos apresentados anteriormente. Como se observa para o caso 3, os valores da DQ entre g_{sint} e g_{VSK} estão na ordem de grandeza 10^{-22} a 10^{-23} e, por consequência, %Erro também está próximo de zero. Neste caso, nota-se que mesmo que a moda da DTA_{VSK} não tenha sido idêntica à original (não levando em conta seu formato triangular devido à aproximação de triângulos isósceles) e os parâmetros geométricos também tenham variado, os valores dos coeficientes ópticos g_{orig} e g_{VSK} foram similares.

III) Método de Busca Direta por Otimização (BDO)

A Figura 33 apresenta o resultado do algoritmo BDO para o estudo de caso 3. É possível verificar o bom desempenho do algoritmo ao estimar a DTA_{Orig} proposta, sem deformação (como deslocamento do eixo), como ocorreu nos resultados dos algoritmos anteriores. Os valores das estimativas iniciais dos parâmetros e a faixa de busca dos mesmos foram equivalentes aos dos estudos de casos anteriores.

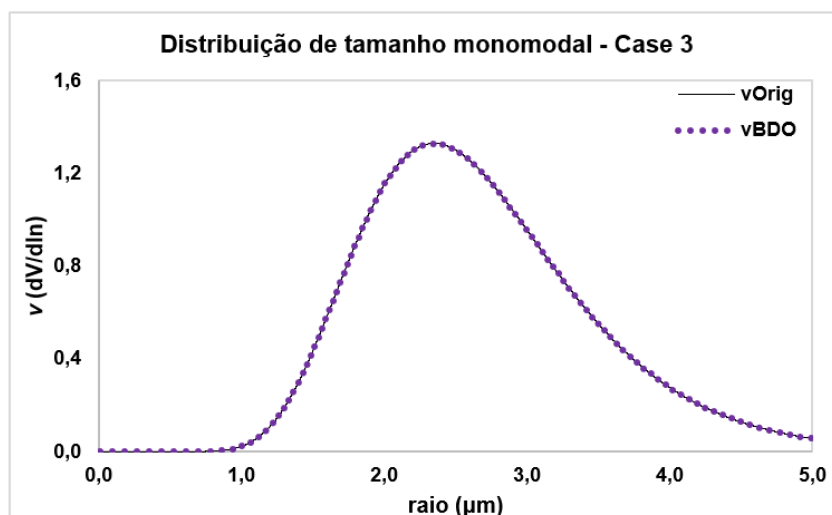


Figura 33 - Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de BDO- Caso 3. Fonte: Própria autoria, 2020.

Os parâmetros geométricos usados na simulação da DTA_{Orig} para o caso 3 foram detectados como parâmetros ótimos da função lognormal n_{BDO} ($\sigma_{BDO} = 1,35 \mu m$ e $\mu_{BDO} = 2,3 \mu m$). Os coeficientes ópticos g_{BDO} calculados tiveram uma alta similaridade com os g_{Orig} . Como consequência, a função objetivo foi equivalente a $F_{min} = 1,34 \cdot 10^{-16}$ (Tabela 12).

Tabela 12 – Valores da F_{min} e dos coeficientes ópticos do caso 3 – Validação BDO.

	g_{Orig}	g_{BDO}	F_{min}
$\beta_{355 nm}$	17,07	17,07	
$\beta_{532 nm}$	17,89	17,89	
$\beta_{1064 nm}$	19,48	19,48	$1,34 \cdot 10^{-16}$
$\alpha_{355 nm}$	18,51	18,51	
$\alpha_{532 nm}$	18,95	18,95	

8.2.4. Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 4

Nos casos apresentados a seguir, estudou-se o comportamento dos algoritmos para estimar distribuições de tamanho bimodais.

Sendo assim, no estudo de caso 4 foi simulada uma DTA_{Orig} bimodal, com os seguintes parâmetros: faixa do raio de 1 a 2,5 μm , desvio padrão $\sigma_1 = 1,1 \mu m$, $\mu_1 = 1,5 \mu m$, $\sigma_2 = 1,35 \mu m$ e $\mu_2 = 2,0 \mu m$. Foi adotado um índice de refração complexo constante de $m = 1,55 + 0,001$ e um passo de integração de 0,001 para o cálculo dos coeficientes ópticos.

I) Método de Regularização de Phillips-Twomey (RPT)

A Figura 34 apresenta o resultado obtido pelo algoritmo RPT para estimar a distribuição volumétrica de tamanho bimodal simulada para o caso 4.

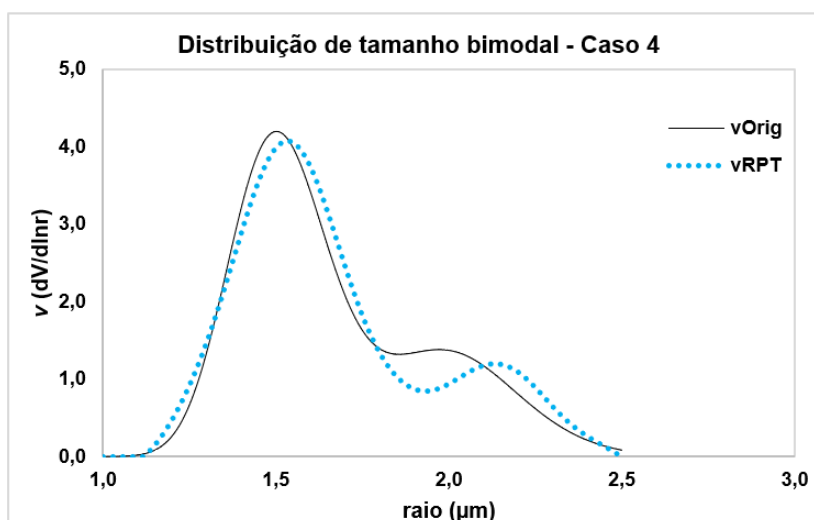


Figura 34 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de RPT - Caso 4. Fonte: Própria autoria, 2020.

Como se observa na Figura 34, a DTA_{Orig} foi estimada relativamente bem pelo algoritmo do método de RPT. Contudo, apresentou uma dificuldade na estimativa da segunda moda, ocorrendo um pequeno deslocamento no eixo do raio. O raio médio obtido foi $\mu_{2,RPT} = 2,16 \mu m$ e o desvio padrão $\sigma_{2,RPT} = 1,8 \mu m$. Na primeira moda os parâmetros foram mais próximos, com $\mu_{1,RPT} = 1,54 \mu m$ e $\sigma_{1,RPT} = 1,11 \mu m$.

Em relação à diferença quadrática e %Erro, estes apresentaram valores próximos a zero, como observado da Tabela 13.

Tabela 13 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 4 – Validação RPT

	g_{Orig}	g_{RPT}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355\text{ nm}}$	15,478	15,478	$1,27 \cdot 10^{-07}$	$2,3010^{-03}$
$\beta_{532\text{ nm}}$	16,069	16,069	$3,5710^{-09}$	$3,7210^{-04}$
$\beta_{1064\text{ nm}}$	18,362	18,357	$2,4510^{-05}$	$2,6910^{-02}$
$\alpha_{355\text{ nm}}$	16,400	16,400	$3,7310^{-07}$	$3,7310^{-03}$
$\alpha_{532\text{ nm}}$	16,751	16,751	$1,4310^{-08}$	$7,1510^{-04}$

II) Método de Regularização de Veselovskii (VSK)

O algoritmo de VSK também recuperou a distribuição volumétrica de tamanho bimodal do caso 4 relativamente bem (Figura 35). No entanto, há um desvio ao estimar a segunda moda.

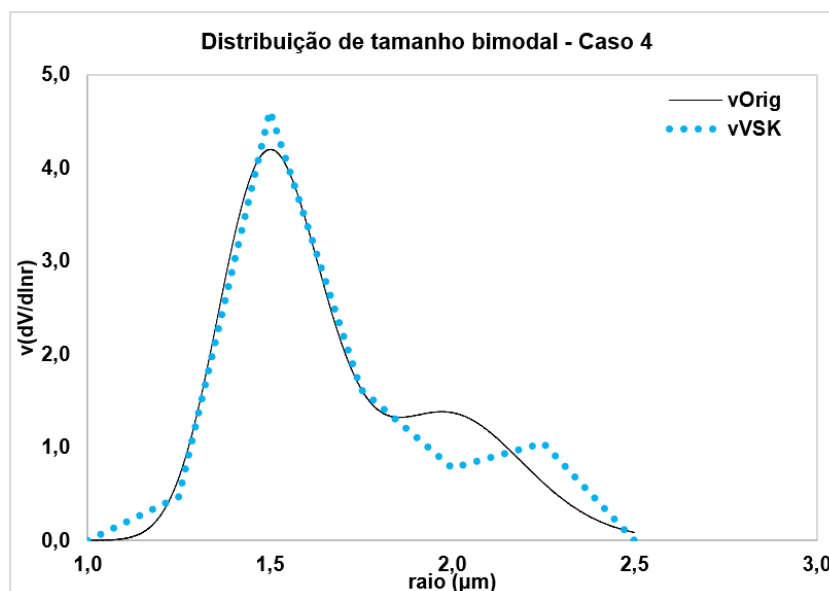


Figura 35 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de VSK - Caso 4. Fonte: Própria autoria, 2020.

Observa-se na DTA_{VSK} ilustrada na Figura 35 um deslocamento no eixo do raio a partir do valor $1,9\ \mu m$, e, por consequência, o valor de $\mu_{2,VSK}$ foi de $2,25\ \mu m$ e com

$\sigma_{2,VSK} = 1,8 \mu m$. A primeira moda da DTA_{VSK} teve valores semelhantes para o raio médio e desvio padrão, $\mu_{1,VSK} = 1,5 \mu m$ e $\sigma_{1,VSK} = 1,1 \mu m$, respectivamente.

Em relação aos valores calculados da DQ e %Erro, estes tenderam a zero, conforme a Tabela 14.

Tabela 14 - Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 4 – Validação VSK

	g_{Orig}	g_{VSK}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355 nm}$	15,478	15,478	$4,543.10^{-26}$	$1,377.10^{-12}$
$\beta_{532 nm}$	16,069	16,069	$3,282.10^{-26}$	$1,127.10^{-12}$
$\beta_{1064 nm}$	18,362	18,362	$5,566.10^{-27}$	$4,063.10^{-13}$
$\alpha_{355 nm}$	16,400	16,400	$5,332.10^{-26}$	$1,408.10^{-12}$
$\alpha_{532 nm}$	16,751	16,751	$4,851.10^{-26}$	$1,314.10^{-12}$

Dentre os resultados obtidos pelo algoritmo de VSK apresentados até o momento, o caso 4 apresentou uma maior similaridade entre g_{Orig} e g_{VSK} (Tabela 14), mesmo com o desvio na segunda moda da DTA_{VSK} (Figura 35).

III) Método de Busca Direta por Otimização (BDO)

Para a validação do método de BDO do caso 4, usou-se uma estimativa inicial dos parâmetros: $\mu_{1,0} = 0,0 \mu m$, $\sigma_{1,0} = 1,1 \mu m$, $\mu_{2,0} = 1,0 \mu m$ e $\sigma_{2,0} = 1,2 \mu m$, com faixa de busca de 0 a 10.

Em relação ao resultado do caso 4 aplicado ao algoritmo do método BDO, nota-se um ótimo resultado na recuperação da DTA_{Orig} , como ocorreu nos casos com distribuições de tamanho monomodal, obtendo-se os mesmos parâmetros usados para a simulação da distribuição original ($\mu_1 = 1,5 \mu m$, $\sigma_1 = 1,1 \mu m$, $\mu_2 = 2,0 \mu m$ e $\sigma_2 = 1,35 \mu m$). A Figura 36 exibe o resultado obtido pelo algoritmo BDO e sua comparação com a DTA_{Orig} .

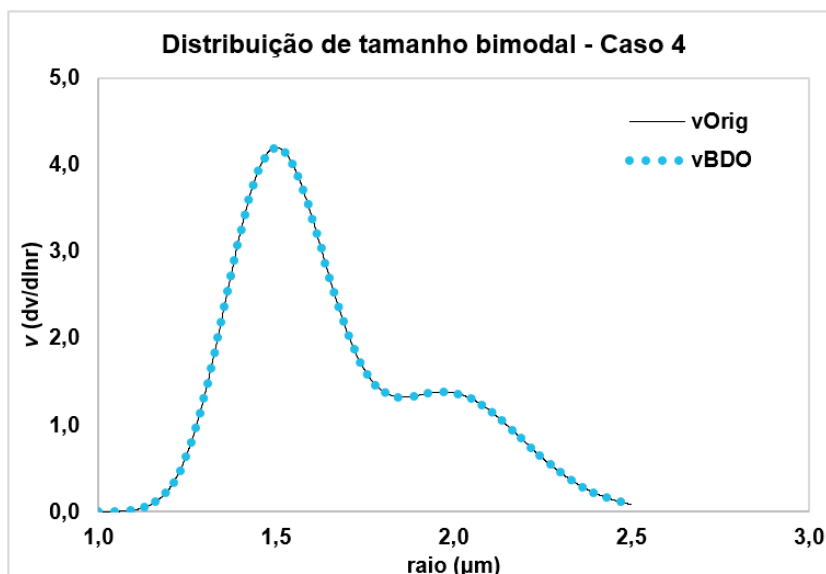


Figura 36 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de BDO- Caso 4. Fonte: Própria autoria, 2020.

Ao analisar o resultado da função objetivo (F_{min}) na Tabela 15, nota-se um valor próximo a zero ($1,13 \cdot 10^{-15}$). Ou seja, pode-se dizer que foram obtidos valores de g_{BDO} similares aos g_{orig} .

Tabela 15 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 4 – Validação BDO

	g_{orig}	g_{BDO}	F_{min}
$\beta_{355 \text{ nm}}$	15,478	15,478	
$\beta_{532 \text{ nm}}$	16,069	16,069	
$\beta_{1064 \text{ nm}}$	18,362	18,362	$1,13 \cdot 10^{-15}$
$\alpha_{355 \text{ nm}}$	16,400	16,400	
$\alpha_{532 \text{ nm}}$	16,751	16,751	

Resumindo os resultados para o caso 4, todos os algoritmos geraram DTAs similares à DTA_{orig} , com valores próximos para os coeficientes ópticos g_{orig} e os calculados a partir da DTA dos algoritmos. Assim, pode-se dizer que, para o caso 4, todos os algoritmos foram eficientes ao estimar a DTA_{orig} proposta (principalmente o algoritmo BDO, por não apresentar diferença nas modas).

8.2.5. Validação com Dados Simulados – Estudo de caso 5

Para o caso 5 também simulou-se uma DTA bimodal, porém com duas modas mais afastadas uma da outra. Foram usados os seguintes parâmetros para simulação: $\mu_1 = 1,0 \mu m$, $\sigma_1 = 1,1 \mu m$, $\mu_2 = 2,3 \mu m$ e $\sigma_2 = 1,2 \mu m$. Adotaram-se os mesmos valores dos casos anteriores para o índice de refração complexo e passo de integração para o cálculo dos coeficientes ópticos.

I) Método de Regularização de Phillips-Twomey (RPT)

O resultado para o caso 5 do algoritmo de RPT está apresentada na Figura 37, e nota-se um desvio na estimativa da DTA bimodal original proposta.

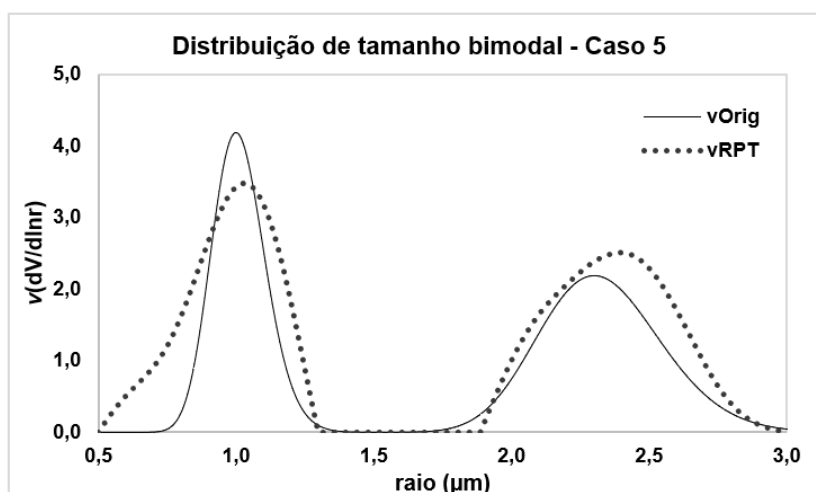


Figura 37 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de RPT - Caso 5. Fonte: Própria autoria, 2020.

Conforme mostra a Figura 37, há distorções nas modas, com a curva de DTA apresentando altura menor na primeira moda e altura maior na segunda moda em relação à DTA_{orig} . Verifica-se também uma deformação na extremidade da primeira moda, nos pontos de 0,5 a 0,7 μm . A DTA_{RPT} apresenta os seguintes valores para os raios médios e desvios padrão: $\mu_{1,RPT} = 1,09 \mu m$, $\sigma_{1,RPT} = 1,2 \mu m$, $\mu_{2,RPT} = 2,56 \mu m$ e $\sigma_{2,RPT} = 1,4 \mu m$.

Contudo, em relação aos resultados da DQ e %Erro (Tabela 16) pode-se dizer que existe uma similaridade entre g_{orig} e g_{RPT} .

Tabela 16 – Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 5 – Validação RPT

	g_{Orig}	g_{RPT}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355\text{ nm}}$	15,876	15,876	$1,78 \cdot 10^{-08}$	$8,41 \cdot 10^{-04}$
$\beta_{532\text{ nm}}$	16,455	16,454	$6,71 \cdot 10^{-08}$	$1,57 \cdot 10^{-03}$
$\beta_{1064\text{ nm}}$	17,213	17,221	$5,70 \cdot 10^{-05}$	$4,39 \cdot 10^{-02}$
$\alpha_{355\text{ nm}}$	16,860	16,859	$1,59 \cdot 10^{-07}$	$2,36 \cdot 10^{-03}$
$\alpha_{532\text{ nm}}$	17,195	17,194	$2,21 \cdot 10^{-07}$	$2,73 \cdot 10^{-03}$

II) Método de Regularização de Veselovskii (VSK)

O resultado da aplicação do algoritmo de VSK para recuperação da DTA_{Orig} simulada para o caso 5 está apresentada na Figura 38.

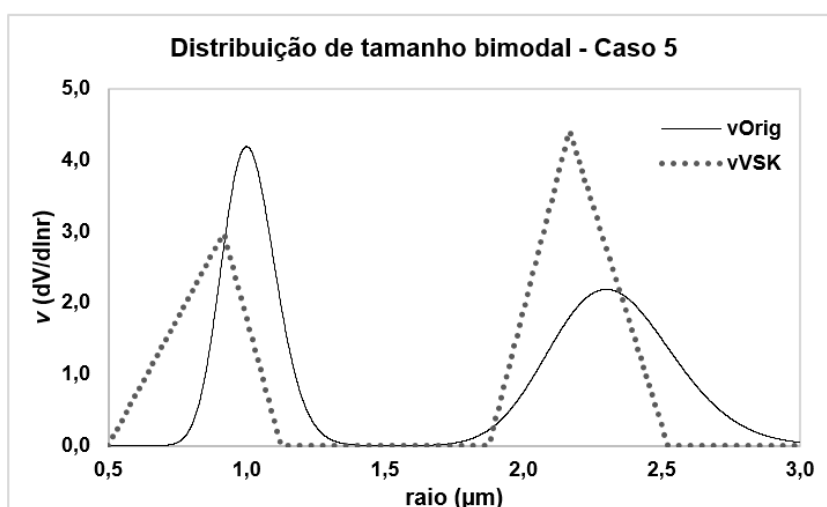


Figura 38 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de VSK - Caso 5.

Própria autoria, 2020.

Como mostra a Figura 38, o algoritmo de VSK apresentou dificuldade em recuperar a distribuição bimodal proposta para o caso 5. Em cada moda visualiza-se um problema na estimativa, para a primeira moda o eixo do raio foi deslocado para a esquerda, com raio médio ($\mu_{1,VSK}$) de $0,9\ \mu m$. Na segunda moda, o eixo também apresenta um deslocamento, com raio médio ($\mu_{2,VSK}$) de $2,2\ \mu m$. Em relação ao desvio-padrão, os valores foram $\sigma_{1,VSK} = 1,2\ \mu m$ e $\sigma_{2,VSK} = 1,2\ \mu m$. Além disso, foram estimadas concentrações diferentes da DTA_{Orig} .

Na Tabela 17, estão apresentados os valores das diferenças quadráticas, DQ, e os erros percentuais relativos, %Erro. Os valores da DQ são maiores, indicando a menor similaridade entre os coeficientes ópticos g_{Orig} e g_{VSK} . Os valores de %Erro, foram semelhantes aos casos 1 e 2. A Tabela 17 mostra ainda uma discrepância nos resultados de $\beta_{1064\text{ nm}}$, com maiores valores de DQ e %Erro para este parâmetro, também.

Tabela 17 - Valores da diferença quadrática e erro percentual do caso 5 – Validação VSK

	g_{Orig}	g_{VSK}	DEQ	%Erro (%)
$\beta_{355\text{ nm}}$	15,876	17,002	1,267	6,621
$\beta_{532\text{ nm}}$	16,455	18,024	2,463	8,708
$\beta_{1064\text{ nm}}$	17,213	19,707	6,217	12,653
$\alpha_{355\text{ nm}}$	16,860	18,016	1,337	6,418
$\alpha_{532\text{ nm}}$	17,195	18,779	2,510	8,436

III) Método de Busca Direta por Otimização

Como mostra a Figura 39, embora as modas estejam mais afastadas, o algoritmo BDO não teve nenhum problema em estimar a DTA_{Orig} (como ocorreu nos outros dois algoritmos). Contudo, as faixas de busca dos raios médio e desvios padrão foram mais estreitas que nos outros estudos de caso, para $\mu_1 = 0,0$ a $3,0\ \mu m$, $\sigma_{1,2} = 1,0$ a $2,5\ \mu m$, $\mu_2 = 1,0$ a $5,0\ \mu m$. Para a estimativa inicial, foram usados os seguintes valores: $\mu_1 = 0,0\ \mu m$, $\sigma_1 = 1,0\ \mu m$, $\mu_2 = 1,0\ \mu m$ e $\sigma_2 = 1,0\ \mu m$.

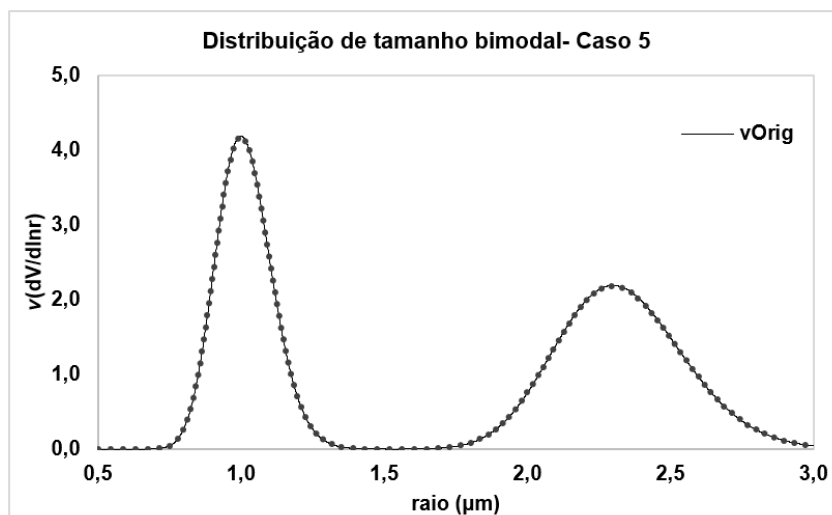


Figura 39 – Comparação entre as DTAs original e a estimada pelo método de BDO- Caso 5. Fonte: Própria autoria, 2020.

Em relação aos coeficientes ópticos calculados, estes têm valores similares aos valores originais, g_{Orig} , os quais correspondem ao valor da função objetivo F_{min} de $1,47 \cdot 10^{-08}$ (Tabela 18).

Tabela 18 - Valores da F_{min} e dos coeficientes ópticos do caso 5 – Validação BDO

	g_{Orig}	g_{BDO}	F_{min}
$\beta_{355 \text{ nm}}$	15,8760	15,8761	
$\beta_{532 \text{ nm}}$	16,4546	16,4547	
$\beta_{1064 \text{ nm}}$	17,2131	17,2132	$1,47 \cdot 10^{-08}$
$\alpha_{355 \text{ nm}}$	16,8597	16,8596	
$\alpha_{532 \text{ nm}}$	17,1946	17,1945	

Em todos os estudos de validação para o método de busca direta por otimização, o algoritmo criado se mostrou eficaz na recuperação dos dois tipos de distribuições de tamanhos estudadas nesta etapa. Provavelmente, essa eficiência pode ser atribuída a estimativa inicial estipulada para o algoritmo iniciar a busca dos parâmetros, pois segundo Wächter (2009) quando o problema é não convexo, podem existir muitos mínimos locais, mas a eficiência da convergência irá depender dos valores dos pontos de partida do algoritmo.

8.3. Sensibilidade dos Algoritmos – Adição de erros randômicos

A seguir, são apresentados os resultados da sensibilidade dos algoritmos diante de possíveis ruídos externos ou erros de medições presentes nos coeficientes ópticos experimentais (parâmetros de entrada dos programas). Este estudo foi realizado para uma distribuição volumétrica monomodal de tamanhos, por ser um caso mais simples. Para a simulação, foram usados os seguintes parâmetros: faixa de raio de 5 a 10 μm , $\mu_1 = 7,5 \mu\text{m}$, $\sigma_1 = 1,1 \mu\text{m}$, índice de refração complexo constante de $m = 1,55 + 0,001i$ e passo de integração de 0,001 para o cálculo dos coeficientes ópticos.

I) Método de Regularização de Phillips-Twomey (RPT)

Inicialmente é apresentada a comparação da resposta do algoritmo sem erros randômicos nos coeficientes ópticos oriundos da DTA_{Orig} para a determinação da DTA_{RPT} , a fim de verificar o comportamento da resposta do algoritmo (Figura 40).

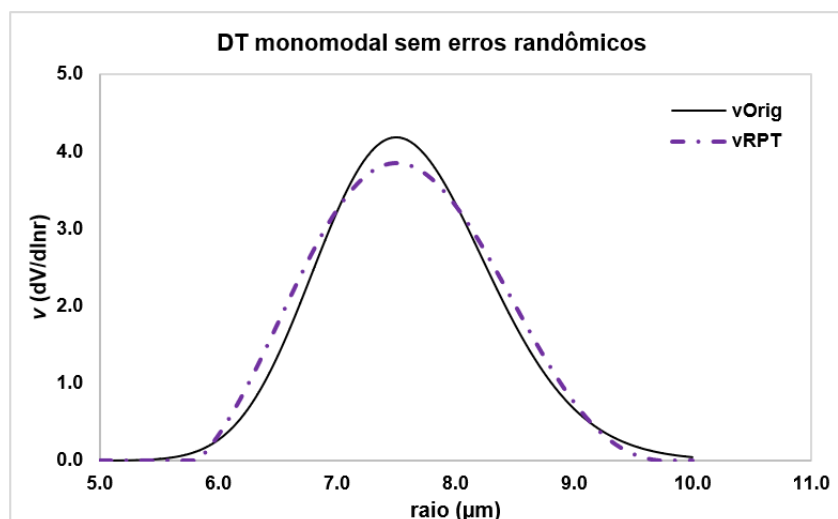


Figura 40 – Comparação da DTA original e a estimada pelo método de RPT sem erros randômicos adicionados nos coeficientes ópticos. Fonte: Própria autoria, 2020.

Como visto na Figura 40, o algoritmo de RPT estimou a DTA_{Orig} relativamente bem. Apresentou apenas valor um pouco inferior à original para o máximo da curva. Essa DTA_{RPT} gerou valores de g_{RPT} similares a g_{Orig} , exibidos na Tabela 19.

Tabela 19 – Valores da diferença quadrática e erro percentual relativo sem adição de erros randômicos -RPT

	g_{Orig}	g_{RPT}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355\text{ nm}}$	59,90	59,901	$2,20 \cdot 10^{-06}$	$2,48 \cdot 10^{-03}$
$\beta_{532\text{ nm}}$	64,15	64,155	$3,01 \cdot 10^{-05}$	$8,55 \cdot 10^{-03}$
$\beta_{1064\text{ nm}}$	45,77	45,766	$1,70 \cdot 10^{-05}$	$9,02 \cdot 10^{-03}$
$\alpha_{355\text{ nm}}$	73,51	73,511	$1,65 \cdot 10^{-06}$	$1,75 \cdot 10^{-03}$
$\alpha_{532\text{ nm}}$	74,33	74,335	$2,82 \cdot 10^{-05}$	$7,15 \cdot 10^{-03}$

A Figura 41 apresenta os resultados com a inserção de erros randômicos (testes com $\pm 0,1$, $\pm 0,5$ e $\pm 1\%$ de erros) para todos os coeficientes ópticos. Como mostrado na Figura 41, o algoritmo estimou relativamente bem a DTA_{Orig} apresentando apenas modas mais baixas que a original.

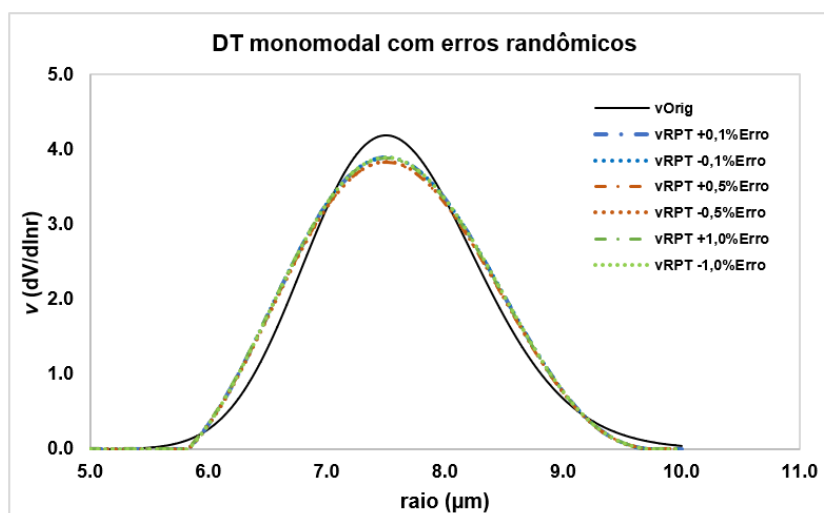


Figura 41 – Comparação da DTA_{Orig} com as DTAs com erros randômicos adicionados nos coeficientes ópticos – RPT. Fonte: Própria autoria, 2020.

A etapa seguinte do estudo de sensibilidade do algoritmo em relação aos coeficientes ópticos foi a inserção de erros randômicos individualmente nos coeficientes ópticos, para avaliar o efeito de cada um deles na inversão, para estimar a distribuição de tamanhos, como apresentado nas Figuras 42A, 42B, 42C e 42D.

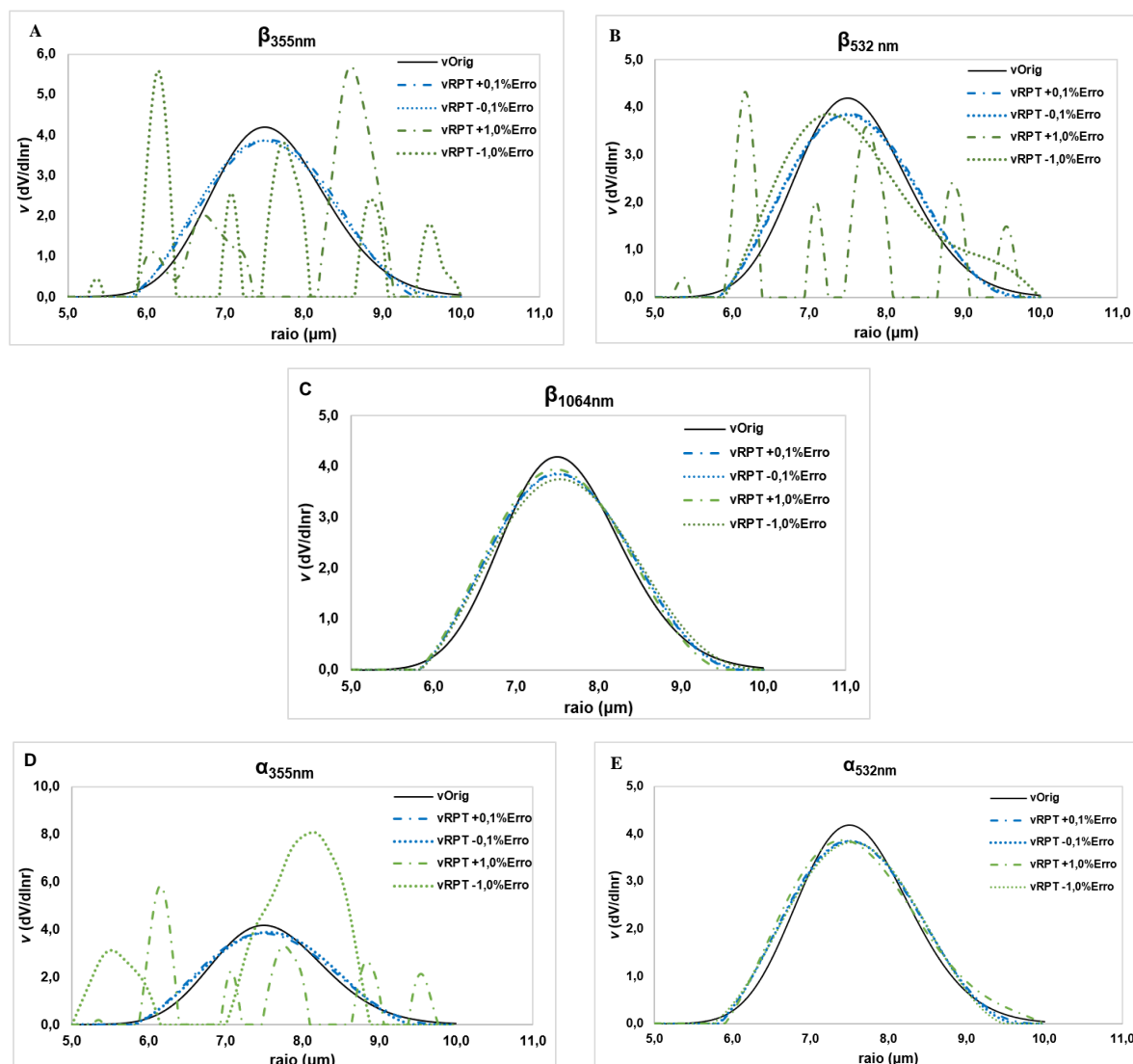


Figura 42 – Resultados das DTAs com adição de erros randômicos em cada coeficiente óptico – Algoritmo RPT. Fonte: Própria autoria, 2020.

Para o método de regularização de Phillips-Twomey quando os erros foram adicionados aos coeficientes $\beta_{1064\text{ nm}}$ (Figura 42C) e $\alpha_{532\text{ nm}}$ (Figura 42E), o problema que se nota é que as modas da DTA_{RPT} ficaram abaixo da original. Porém, quando inseridos nos outros três coeficientes ópticos, erros $\pm 1,0\%$ causam problemas de convergência no algoritmo, como visto nas Figuras 42A, 42B e 42D.

II) Método de Regularização de Veselovskii (VSK)

Realizou-se estudo similar para o algoritmo do método de Veselovskii. A Figura 43 ilustra a comparação entre a DTA_{Orig} simulada com a DTA_{VSK} , estimada pelo algoritmo sem erros inseridos nos g_{Org} .

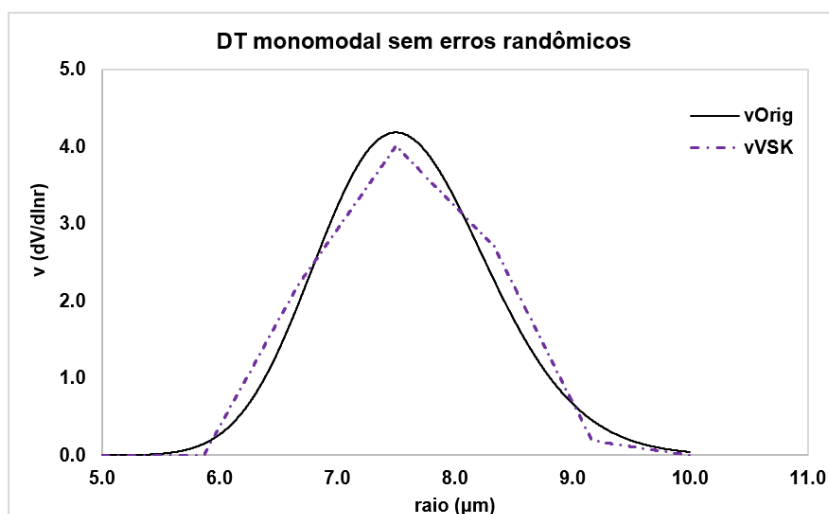


Figura 43 – Comparação entre DTA original e a estimada pelo método de VSK sem erros randômicos adicionados aos coeficientes ópticos. Fonte: Própria autoria, 2020.

Conforme mostra a Figura 43, o algoritmo de VSK estimou a DTA_{Orig} com baixo erro, gerando valores de g_{VSK} similares aos de g_{Orig} (Tabela 20).

Tabela 20 – Valores da diferença quadrática e erro percentual sem adição de erros randômicos -VSK

	g_{Orig}	g_{VSK}	DQ	%Erro (%)
$\beta_{355\text{ nm}}$	59,90	60,21	0,096	0,52
$\beta_{532\text{ nm}}$	64,15	64,48	0,109	0,52
$\beta_{1064\text{ nm}}$	45,77	46,01	0,058	0,53
$\alpha_{355\text{ nm}}$	73,51	73,87	0,132	0,50
$\alpha_{532\text{ nm}}$	74,33	74,70	0,136	0,50

A Figura 44 apresenta os resultados obtidos pelo algoritmo de VSK diante aos erros randômicos inseridos nos coeficientes de entrada.

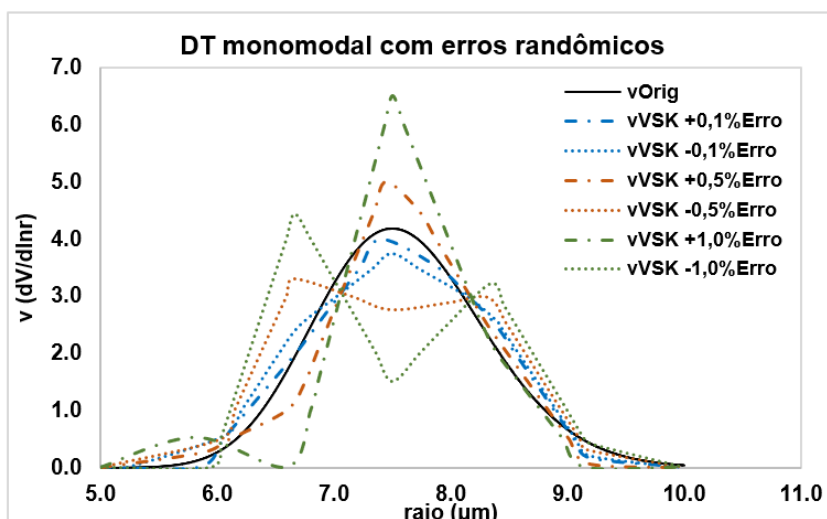
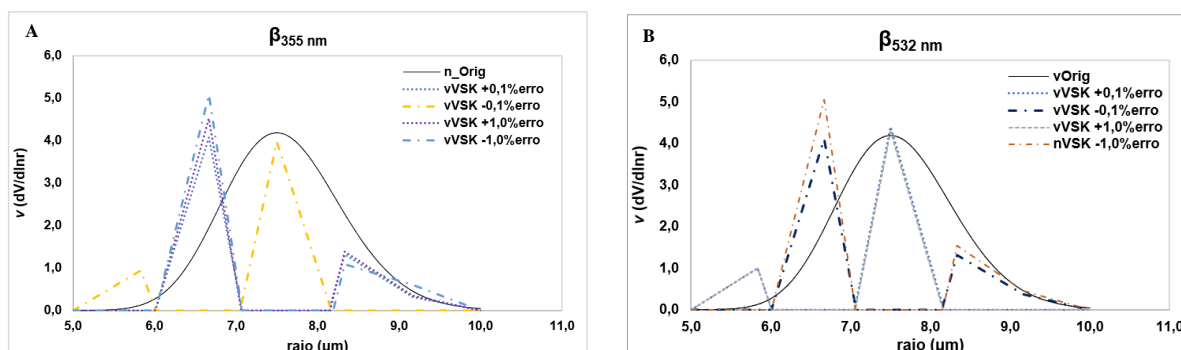


Figura 44 – Comparação da DTA_{Orig} com as DTAs com erros randômicos adicionados aos coeficientes ópticos – VSK. Fonte: Própria autoria, 2020.

Como mostrado na Figura 44, o algoritmo do método de VSK conseguiu estimar a DTA_{Orig} melhor quando os “ruídos e/ou erros de medidas” presentes nos coeficientes de entradas são pequenos, como ocorreu quando se inseriram erros de $\pm 0,1\%$ (linhas azuis). A partir de $\pm 0,5\%$ (linhas laranjas), nota-se uma deformação nas modas, para erros de $+0,5\%$ a moda foi maior que a original; já com erro de $-0,5\%$ a distribuição passou a ser bimodal (como ocorreu também para erro de $-1,0\%$). Quando adicionado um erro de $+1,0\%$ (linha verde) a DTA_{VSK} apresentou uma moda maior que a original.

As Figuras 45A, 45B, 45C e 45D apresentam os resultados do estudo de sensibilidade do método de Veselovskii quando os erros randômicos são inseridos individualmente.



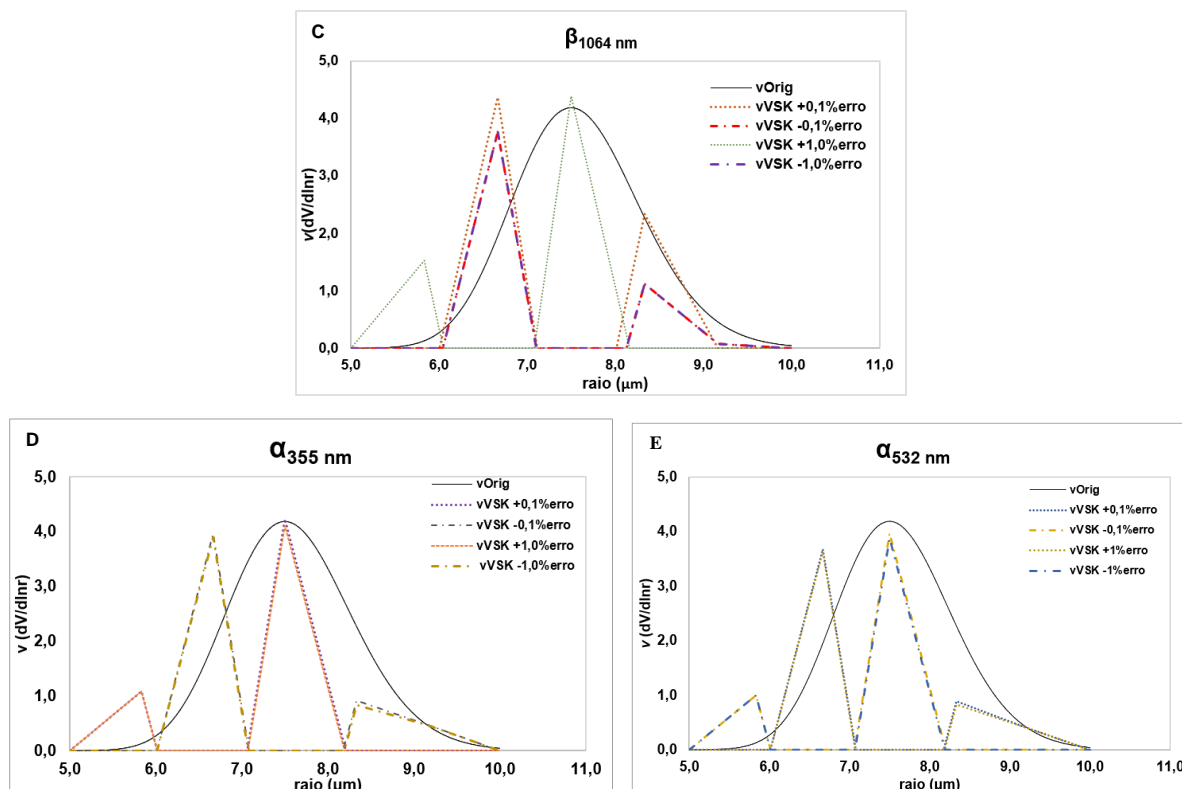


Figura 45 – Resultados das DTAs_{VSK} quando adicionando erros randômicos em cada coeficiente óptico - VSK. Fonte: Própria autoria, 2020.

Mesmo para erros pequenos, o algoritmo encontra dificuldade para a reprodução da distribuição volumétrica de tamanho original. Todos os coeficientes ópticos tiveram efeito na inversão para a obtenção da DTA quando usado o algoritmo de VSK, como visto nas Figuras 45A, 45B, 45C e 45D.

III) Método de Busca Direta por Otimização (BDO)

A Figura 46 apresenta o resultado da recuperação da DTA_{Orig} simulada sem a adição dos erros randômicos nos coeficientes ópticos. Observa-se que o algoritmo de BDO não teve nenhum tipo de problema ao estimar a distribuição de tamanho proposta.

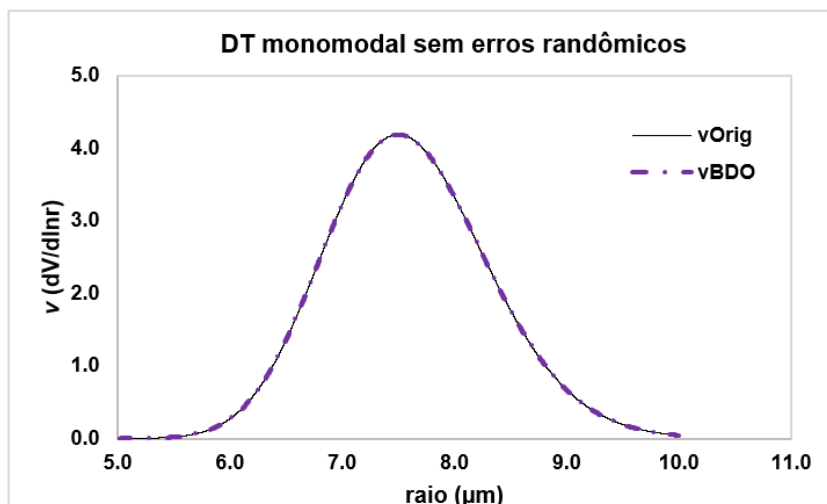


Figura 46 – Comparação entre DTAs original e a estimada pelo método de BDO sem erros randômicos adicionados aos coeficientes ópticos. Fonte: Própria autoria, 2020.

A partir da DTA_{BDO} foram calculados os g_{BDO} , como mostrados na Tabela 21. Os valores são similares ao g_{Orig} , obtendo-se o valor de $1,25 \cdot 10^{-09}$ para a função objetivo (F_{min}).

Tabela 21 - Valores da F_{min} e dos coeficientes ópticos sem adição de erros randômicos - BDO

	g_{Orig}	g_{BDO}	F_{min}
$\beta_{355 \text{ nm}}$	59,906	59,906	
$\beta_{532 \text{ nm}}$	64,154	64,154	
$\beta_{1064 \text{ nm}}$	70,363	70,363	$1,25 \cdot 10^{-09}$
$\alpha_{355 \text{ nm}}$	73,515	73,515	
$\alpha_{532 \text{ nm}}$	74,337	74,337	

A Figura 47 exibe os resultados das estimativas da DTA_{Orig} pelo algoritmo BDO quando adicionados os erros randômicos aos coeficientes ópticos g_{Orig} .

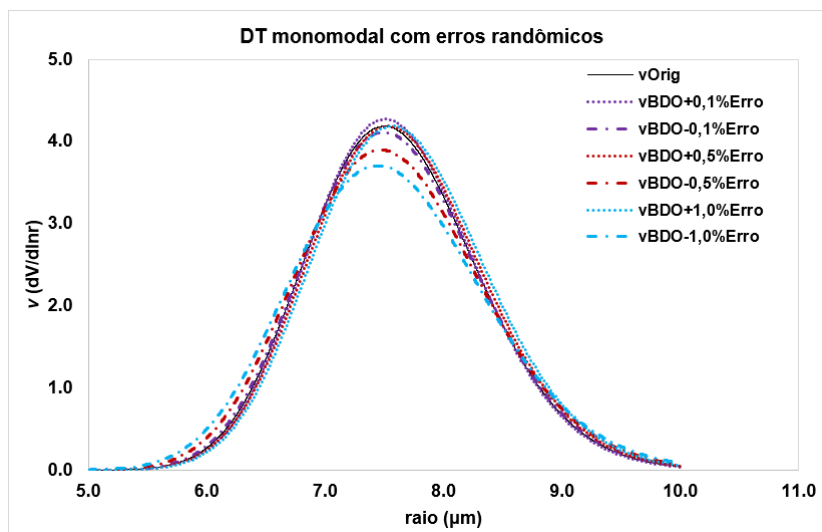
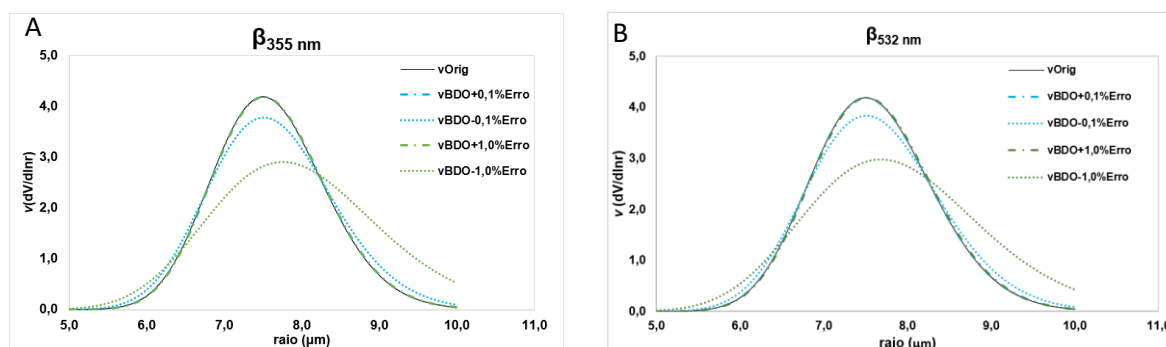


Figura 47 – Comparação da DTA_{Orig} com as DTAs com erros randômicos adicionados aos coeficientes ópticos - BDO. Fonte: Própria autoria, 2020.

Quando adicionados erros mínimos de $\pm 0,1\%$, o algoritmo de BDO conseguiu estimar com precisão a DTA_{Orig} (Figure 47). Porém, quando adicionados erros de $-0,5$ e $-1,0\%$, as modas resultantes do algoritmo BDO ficaram um pouco abaixo da original. Mesmo assim, é possível dizer que os algoritmos RPT e BDO, nesta etapa do estudo, mostraram melhor desempenho ao estimar a DTA_{Orig} que o algoritmo do método de VSK.

As Figuras 48A, 48B, 48C, 48D e 48E apresentam os resultados obtidos pelo método BDO quando foram adicionados individualmente os erros randômicos.



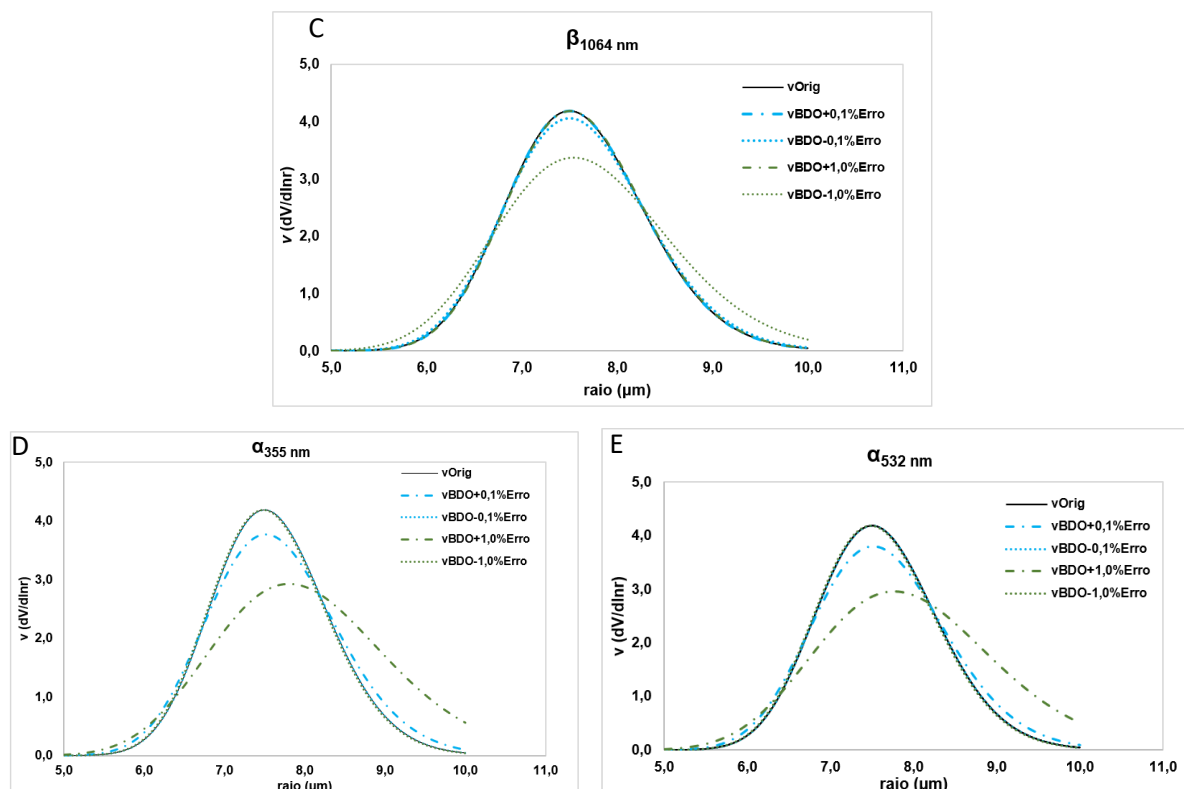


Figura 48 – Resultados das DTAs_{BDO} quando adicionados erros randômicos em cada coeficiente óptico - BDO. Fonte: Própria autoria, 2020.

Como se observa nas Figuras 48A a 48E, quando adicionados erros de +0,1% nos coeficientes β_{355nm} (Figura 48A), β_{532nm} (Figura 48B) e β_{1064nm} , o algoritmo estima com precisão a DTA_{Orig}, sem deformação na moda. Porém, quando são adicionados erros randômicos nos coeficientes modas da DTA_{BDO} ficaram abaixo da original. Ao adicionar -0,1% o comportamento foi oposto, não houve qualquer tipo de deformação na DTA_{BDO}. Já quando adicionados nos coeficientes β_{355nm} , β_{532nm} e β_{1064nm} , as modas ficaram inferiores ao da moda original. Em relação a +1,0 % de erro adicionados aos $\beta_{355 nm}$, $\beta_{532 nm}$ e $\beta_{1064 nm}$, não apresenta nenhum problema na distribuição estimado quando comparada a original. Porém, quando esses mesmos erros são adicionados a $\alpha_{355 nm}$ e α_{532nm} , ocorre uma deformação na moda.

8.4. Aplicação dos Algoritmos de Inversão a Dados Experimentais do Lidar

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos pelos algoritmos RPR, VSK e BDO quando usados os coeficientes experimentais ópticos do sistema lidar, com o

objetivo de estimar a distribuição volumétrica de tamanhos de aerossol atmosférico da cidade de São Paulo.

As DTAs obtidas pelos algoritmos foram comparadas com as DTA da rede AERONET, para fins de validação.

8.4.1. Estudo de Caso 1: 28 de maio de 2018

No estudo de caso 1 foram usados os dados experimentais das medidas do sistema lidar no dia 28 de maio de 2018 às 17:06 UTC, para esse dia e horário, como disponibilizado no site da rede AERONET¹³, o índice de refração m foi aproximadamente igual a $1,51 + 0,003i$, mantendo-se relativamente constante em função do comprimento de onda (Figura 49). Assim, inseriu-se esse valor como um dos parâmetros de entrada dos algoritmos dos métodos de regularização de Phillips-Twomey, Veselovskii e o de Busca Direta por Otimização.

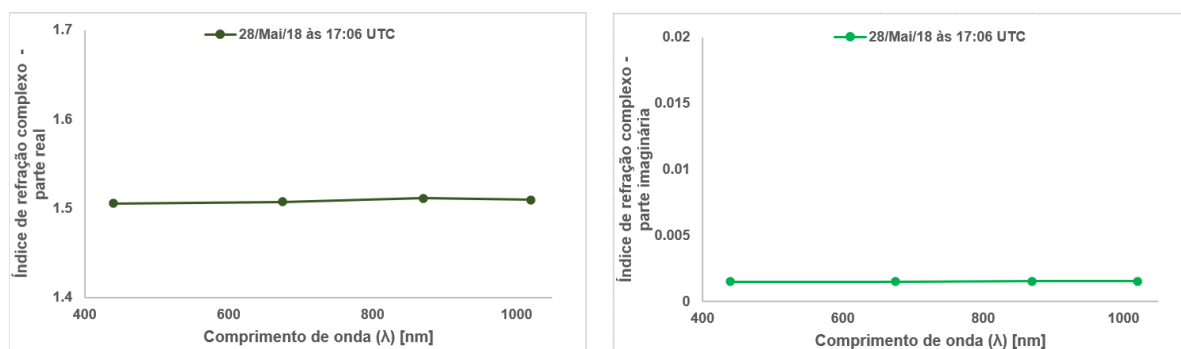


Figura 49 – Índice de refração complexo em relação aos comprimentos de ondas medidos pelo fotômetro solar da rede AERONET para o dia 28/Mai/2018 às 17:06 UTC. Fonte: Dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3.

A Figura 50 apresenta a distribuição temporal da intensidade de luz, por meio do sinal corrigido com a distância ao quadrado, obtido pelo sistema lidar para o canal 532 nm.

¹³ Site AERONET: <https://aeronet.gsfc.nasa.gov>

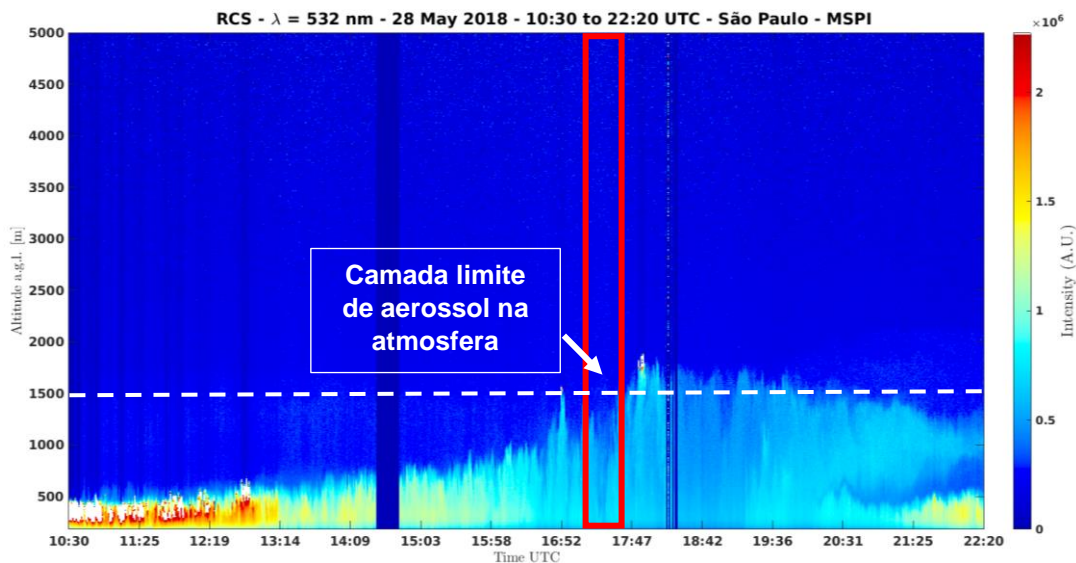


Figura 50 – Sinal corrigido do lidar para o dia 28 de maio de 2018 - Quick-look $\lambda_{532\text{nm}}$. Fonte: Laboratório de Aplicações Ambientais de Laser – LAAL – Disponível em: <http://gescon.ipen.br/leal/6-1.Measurements-2018.html#>

Na Figura 50, é possível visualizar que a camada limite de aerossol por volta das 17:06 UTC (dentro da faixa em vermelho) varia entre uma distância de 1200 e 1500 m.

Devido a isso, para que se possa realizar a comparação da distribuição volumétrica de tamanho de aerossol da rede AERONET ($DTA_{AERONET}$) e as estimadas pelos algoritmos, fez-se a média de cada um dos coeficientes ópticos desde a altura de 300 m (*overlap* do sistema lidar usado) até 1300 m (limite da camada de aerossóis).

Para o dia 28 de maio às 17:06 UTC, os parâmetros geométricos da distribuição de tamanho de aerossóis da rede AERONET ($DTA_{AERONET}$) foram: raio médio da moda fina ($\mu_{1,AERONET}$) igual a $0,14 \mu\text{m}$, raio médio da moda grossa ($\mu_{2,AERONET}$) igual a $5,06 \mu\text{m}$, desvio padrão da moda fina ($\sigma_{1,AERONET}$) igual a $0,18 \mu\text{m}$, desvio padrão da moda grossa ($\sigma_{2,AERONET}$) igual a $3,63 \mu\text{m}$, com as alturas da concentração normalizadas para a moda fina (H_1) igual a $2,21 \cdot 10^5$ e grossa (H_2) igual a $2,18 \cdot 10^5$. A Figura 51 exibe a distribuição normalizada de distribuição de tamanho de aerossóis fornecida pela rede AERONET.

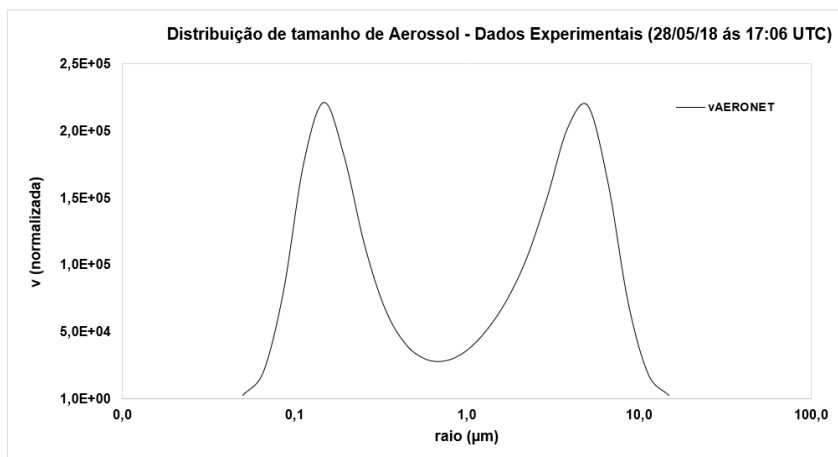


Figura 51 – Distribuição de aerossóis na cidade de São Paulo no dia 28 de maio de 2018 às 17:06 – AERONET. Fonte: dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3.

I) Método de Regularização de Phillips-Twomey (RPT)

A Figura 52 apresenta o resultado obtido pelo algoritmo do método de Regularização de Phillips-Twomey para o dia de medida de 28 de maio de 2018.

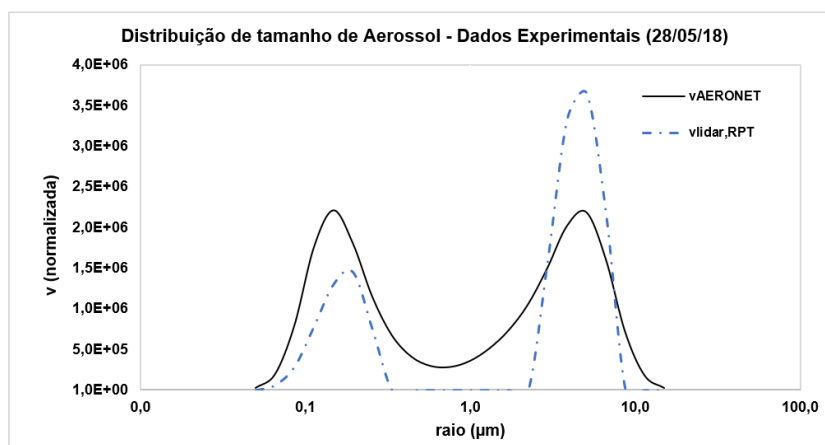


Figura 52 - Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de RPT – 28/05/18 as 17:06 UTC. Fonte: Linha contínua preta: dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3); Linha tracejada: Dados de Própria autoria, 2020.

Conforme apresentado na Figura 52, o algoritmo de RPT obteve a função da DTA (v_{RPT}) relativamente semelhante à da AERONET ($v_{AERONET}$). Contudo, mesmo que suas duas modas apresentem valores relativamente próximos à da $v_{AERONET}$ ($\mu_{1,RPT} = 0,19 \mu\text{m}$

e $\mu_2 = 5,06 \mu\text{m}$), o desvio padrão da moda fina ($\sigma_{1,RPT}$) ficou acima ($0,23 \mu\text{m}$) ao $\sigma_{1,AERONET}$. Já o desvio padrão da moda grossa ($\sigma_{2,RPT}$) apresenta valor próximo, com $3,64 \mu\text{m}$. A concentração normalizada da moda fina ($H_{1,RPT}$) foi de $1,45 \cdot 10^5$ e a da moda grossa (H_2) foi de $3,65 \cdot 10^5$, e ficou diferente da $v_{AERONET}$, com valores abaixo (moda fina) e acima (moda grossa).

II) Método de Regularização Veselovskii (VSK)

Como se observa na Figura 53, o algoritmo desenvolvido para o método de Veselovskii não obteve uma distribuição da concentração de aerossol com os coeficientes ópticos do lidar semelhante à da rede AERONET.

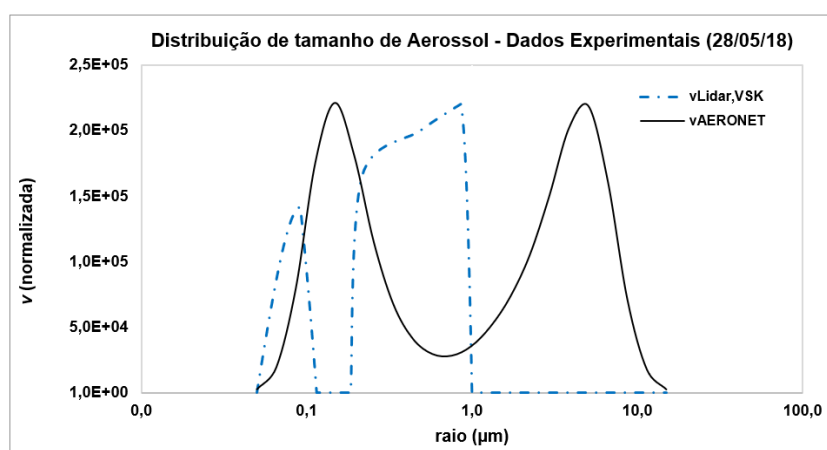


Figura 53 - Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de RPT – 28/05/18 às 17:06 UTC. Fonte: Linha contínua preta: dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3; Linha tracejada: dados de Própria autoria, 2020.

Analisando o comportamento da distribuição $v_{Lidar,VSK}$ em relação a $v_{AERONET}$ na figura acima, nota-se uma diferença principalmente na faixa de raio da segunda moda (estimada em $0,18$ a $1,12 \mu\text{m}$, com raio médio ($\mu_{2,VSK}$) em $0,48 \mu\text{m}$).

III) Método de Busca Direta por otimização (BDO)

A Figura 54 apresenta a estimativa da concentração de aerossóis obtida pelo algoritmo do método de BDO, cujo resultado é semelhante ao da AERONET para o dia 28 de maio 2018, quando comparado aos resultados dos outros dois algoritmos. As faixas de busca dos raios médios e desvios padrão foram: $\mu_1 = 0,0$ a $3,0 \mu\text{m}$, $\sigma_1 = 0,0$ a $2,0 \mu\text{m}$, $\mu_2 = 1,0$ a $6,0 \mu\text{m}$ e $\sigma_2 = 0,0$ a $6,0 \mu\text{m}$. Como estimativa inicial foram usados os seguintes valores: $\mu_{0,1} = 0,0 \mu\text{m}$, $\sigma_{0,1} = 0,0 \mu\text{m}$, $\mu_{0,2} = 1,0 \mu\text{m}$ e $\sigma_{0,2} = 1,0 \mu\text{m}$.

Conforme se observa na Figura 54, tanto a moda final quanto a moda grossa foram recuperadas com nas mesmas faixas de raios que a $v_{aeronet}$, apresentando os raios médios e desvios padrões com valores semelhantes a da AERONET ($\mu_{1,BDO} = 0,14 \mu\text{m}$, $\mu_{2,BDO} = 5,06 \mu\text{m}$, $\sigma_{1,BDO} = 0,18 \mu\text{m}$ e $\sigma_{2,BDO} = 3,63 \mu\text{m}$). Porém, as concentrações normalizadas ficaram um pouco superiores aos da $DTA_{AERONET}$ ($H_1 = 2,32 \cdot 10^5$ e $H_2 = 2,27 \cdot 10^5$).

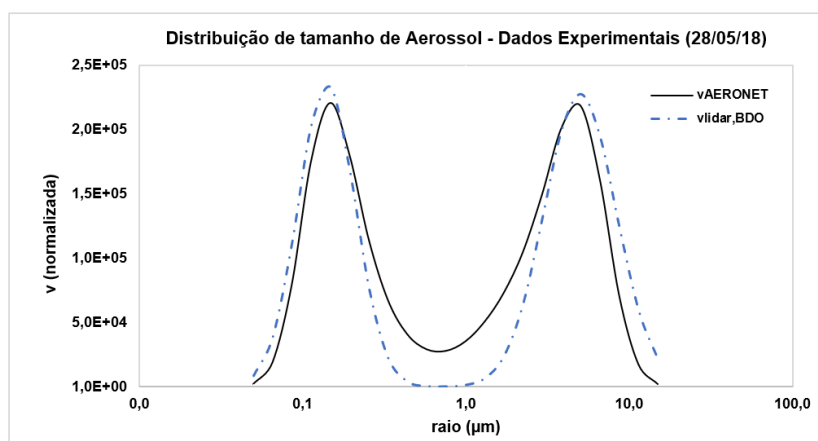


Figura 54 - Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de BDO – 28/05/18 às 17:06 UTC. Fonte: Linha contínua preta: dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3; Linha tracejada: Dados de Própria autoria, 2020.

8.4.2. Estudo de Caso 2: 25 de junho de 2018

O segundo estudo de caso realizado com os dados experimentais do lidar foi com as medidas do dia 25 de junho de 2018 às 15:11 UTC. Segundo a rede

AERONET, para esse dia e horário, o índice de refração m era igual a $1,6 + 0,002i$ (Figura 55), em função do comprimento de onda.

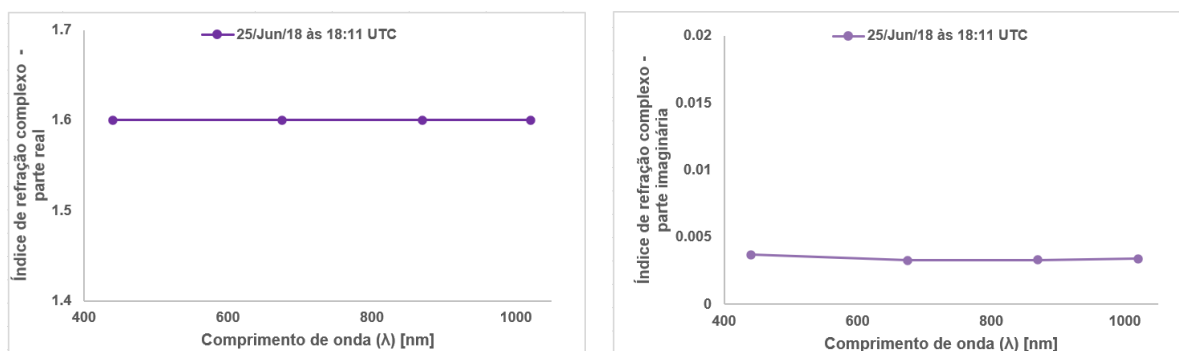


Figura 55 – Índice de refração complexo em relação aos comprimentos de ondas medidos pelo fotômetro solar da rede AERONET para o dia 25/Jun/2018 às 18:11 UTC. Fonte: dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3.

Para o dia 25 de junho de 2018, conforme a Figura 56, a camada limite de aerossol na atmosfera é indicada para às 18:11 UTC a uma altura de aproximadamente 3000 m. A média dos coeficientes ópticos usada nos algoritmos de inversão foi realizada entre 300 m a 3000 m.

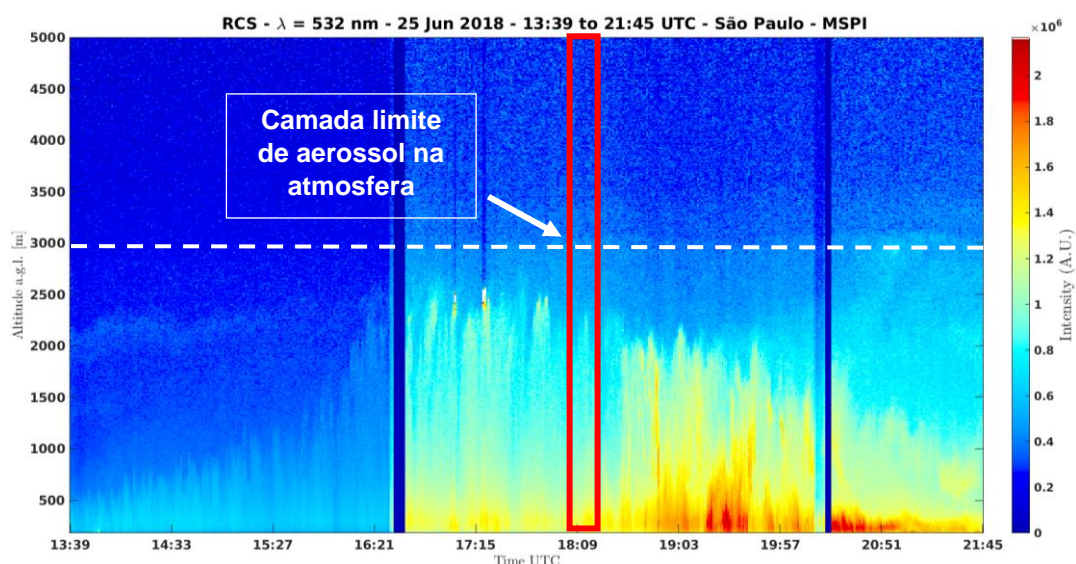


Figura 56 – Sinal corrigido do Lidar em relação a altura no dia 25 de junho de 2018 - Quick-look $\lambda_{532\text{nm}}$. Fonte: Laboratório de Aplicações Ambientais de Laser – LAAL – Disponível em: <http://gescon.ipen.br/leal/6-1.Measurements-2018.html#>

No dia 25 de junho às 18:11 UTC (dentro da faixa em vermelho), os parâmetros geométricos da distribuição de tamanho de aerossóis da rede AERONET

(DTA_{AERONET}) foram: raio médio da moda fina (μ_1) 0,11 μm , raio médio da moda grossa (μ_2) 3,85 μm , desvio padrão da moda fina (σ_1) 0,14 μm desvio padrão da moda grossa (σ_2) 3,63 μm , com as concentrações normalizadas em $H_1 = 1,47 \cdot 10^5$ e $H_2 = 4,34 \cdot 10^5$.

A Figura 57 mostra a DTA_{AERONET} normalizada obtida.

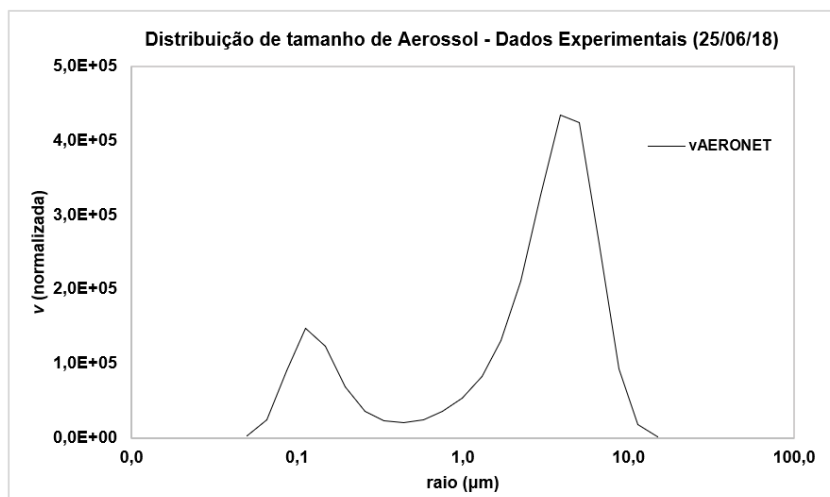


Figura 57 - Distribuição de aerossóis da cidade de São Paulo no dia 25 de junho de 2018 às 18:11 – AERONET. Fonte: Dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3;

I) Método de Regularização de Phillips-Twomey (RPT)

A Figura 58 mostra a comparação entre a distribuição volumétrica de tamanho de aerossol obtida com o algoritmo do método de RPT usando os dados experimentais do lidar como entrada do programa e a DTA obtida pela AERONET para comparação.

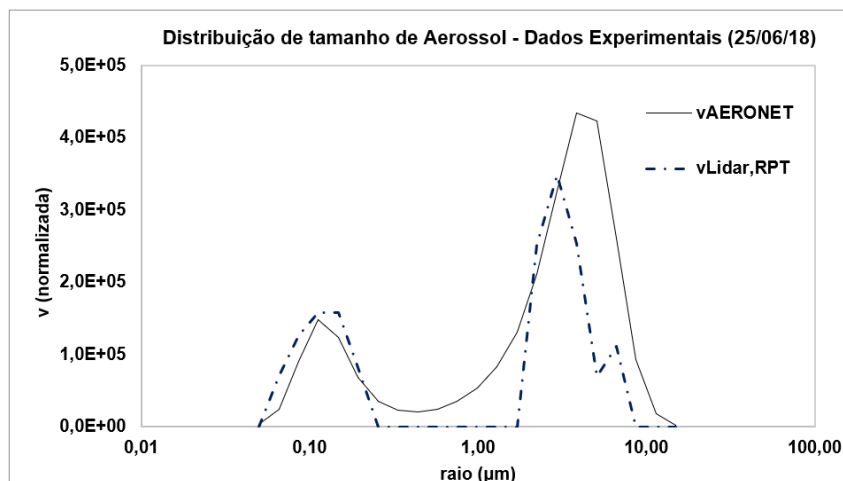


Figura 58 – Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de RPT – 25/06/18 às 18:11 UTC. Fonte: Linha contínua preta: Dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3; Linha tracejada: Dados de Própria autoria, 2020.

A Figura 58 mostra que o resultado do algoritmo desenvolvido para o método de Phillips-Twomey se diferenciou da função da DTA da AERONET ($v_{AERONET}$). A moda fina, foi uma estimativa até que próxima à da $v_{AERONET}$. Porém a moda grossa, apresentou um deslocamento a esquerda no eixo do raio uma deformação quando comparada à da rede AERONET.

II) Método de Regularização de Veselovskii (VSK)

O algoritmo desenvolvido para o método de Veselovskii não respondeu bem com os coeficientes ópticos experimentais do sistema lidar do dia 25 de junho de 2018 (apresentado na Figura 59). Nota-se um deslocamento no eixo do raio da moda grossa. Nos estudos de casos realizados com os dados simulados, verificou-se também uma dificuldade do algoritmo quando as duas modas estão mais afastadas.

Um fato que pode ter influenciado o mau desempenho do algoritmo, é a sua sensibilidade aos erros experimentais (como visto nos testes de sensibilidade) que podem estar presentes nos coeficientes ópticos (como ruídos externos que não foi possível serem suavizados, por exemplo, raios solares) ou possíveis erros numéricos gerados dentro do próprio algoritmo desenvolvido para o método de Veselovskii.

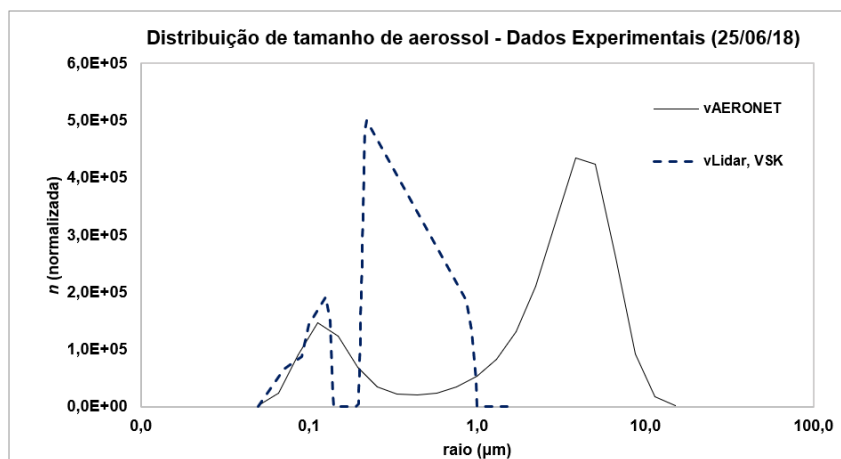


Figura 59 – Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de VSK–25/06/18. Fonte: Linha contínua preta: Dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3); Linha tracejada: Dados de Própria autoria, 2020.

1) Método de Busca Direta por Otimização (BDO)

As faixas de busca dos raios médios e desvios padrão foram as mesmas usadas nos estudo de caso do dia 28/05/2018, assim como os valores para as estimativas iniciais. A Figura 60 apresenta a comparação entre as distribuições de tamanhos de aerossóis usando os coeficientes ópticos do lidar no algoritmo BDO e a DTA fornecida pela rede AERONET, normalizada, para o dia 25 de julho de 2018, horário de medida às 18:11 UTC.

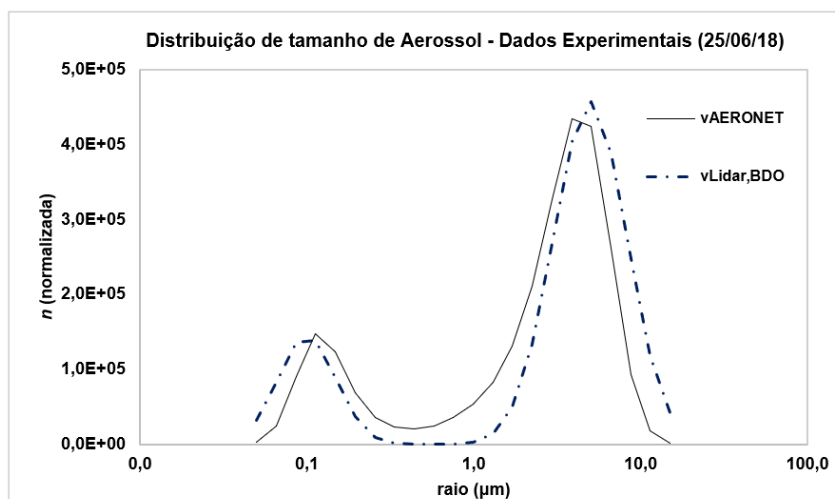


Figura 60 - Comparação entre a DTA obtida pela AERONET e a estimada pelo método de DBO – 25/06/18 às 18:11 UTC. Fonte: Linha contínua preta: Dados disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3; Linha tracejada: Dados de Própria autoria, 2020.

Como visto na Figura 60, o método de Busca Direta por Otimização (BDO) conseguiu recuperar uma curva de distribuição volumétrica de tamanho de aerossóis próxima à da rede AERONET. Porém, observa-se um pequeno deslocamento no eixo do raio das partículas. Obteve-se um raio médio $\mu_{1,BDO} = 0,10 \mu\text{m}$ e $\mu_2 = 5,06 \mu\text{m}$. Os outros parâmetros ficaram próximos aos da $v_{AERONET}$: $\sigma_{1,BDO} = 0,14 \mu\text{m}$, $\sigma_{2,BDO} = 3,63 \mu\text{m}$, $H_{1,BDO} = 1,38.105$ e $H_{2,BDO} = 4,57.105$. Além do deslocamento no eixo, nota-se que há um erro nas extremidades da DTA estimada pelo algoritmo. Esses problemas podem ter sido causados por possíveis erros experimentais, ou erros numéricos presentes na estimativa dos coeficientes ópticos do lidar.

8.5. Aplicação de Redes Neurais Artificiais no processamento Sinais Primários do Lidar

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos com a aplicação da técnica de Redes Neurais Artificiais (RNA) para a calibração dos sinais de retroespalhamento do lidar, como forma de associação com distribuições de tamanhos de aerossóis da rede AERONET.

As Figura 61A a F e 62A a F mostram comparações entre os resultados do modelo e os parâmetros experimentais obtidos das distribuições de tamanho de

aerossol da rede AERONET. Foram usados 30 dados para o conjunto de aprendizado de rede e 11 dados para o conjunto de testes (diferentes dos utilizados no processo de aprendizado).

Para os testes, a configuração do modelo de rede neural compreendeu 20 entradas: 4 pontos na atmosfera para cada um dos 5 canais, correspondentes a 4 alturas a partir do equipamento, conforme já descrito, 6 parâmetros de saída calculados a partir da distribuição volumétrica de tamanho de aerossol da rede AERONET e 9 neurônios na camada oculta.

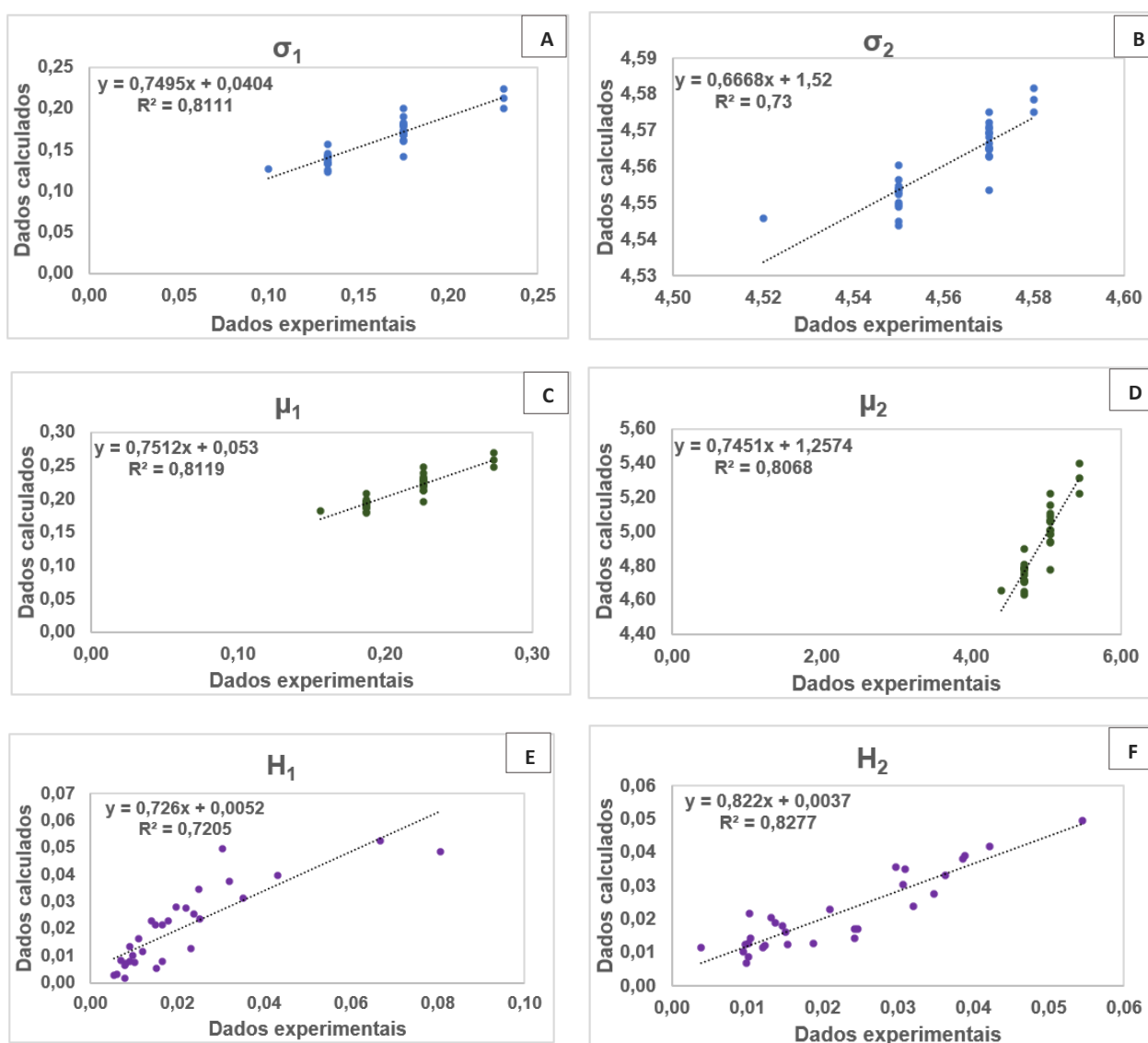


Figura 61 - Comparações entre valores experimentais e calculados pela RNA para o conjunto de aprendizado. Legenda: (A) Desvio padrão da moda fina (σ_1), (B) Desvio padrão da moda grossa (σ_2), (C) raio médio da moda fina (μ_1), (D) raio médio da moda grossa (μ_2), (E) pico de distribuição da moda fina (H_1) e (F) pico de distribuição da moda grossa (H_2). Fonte: Própria autoria, 2020.

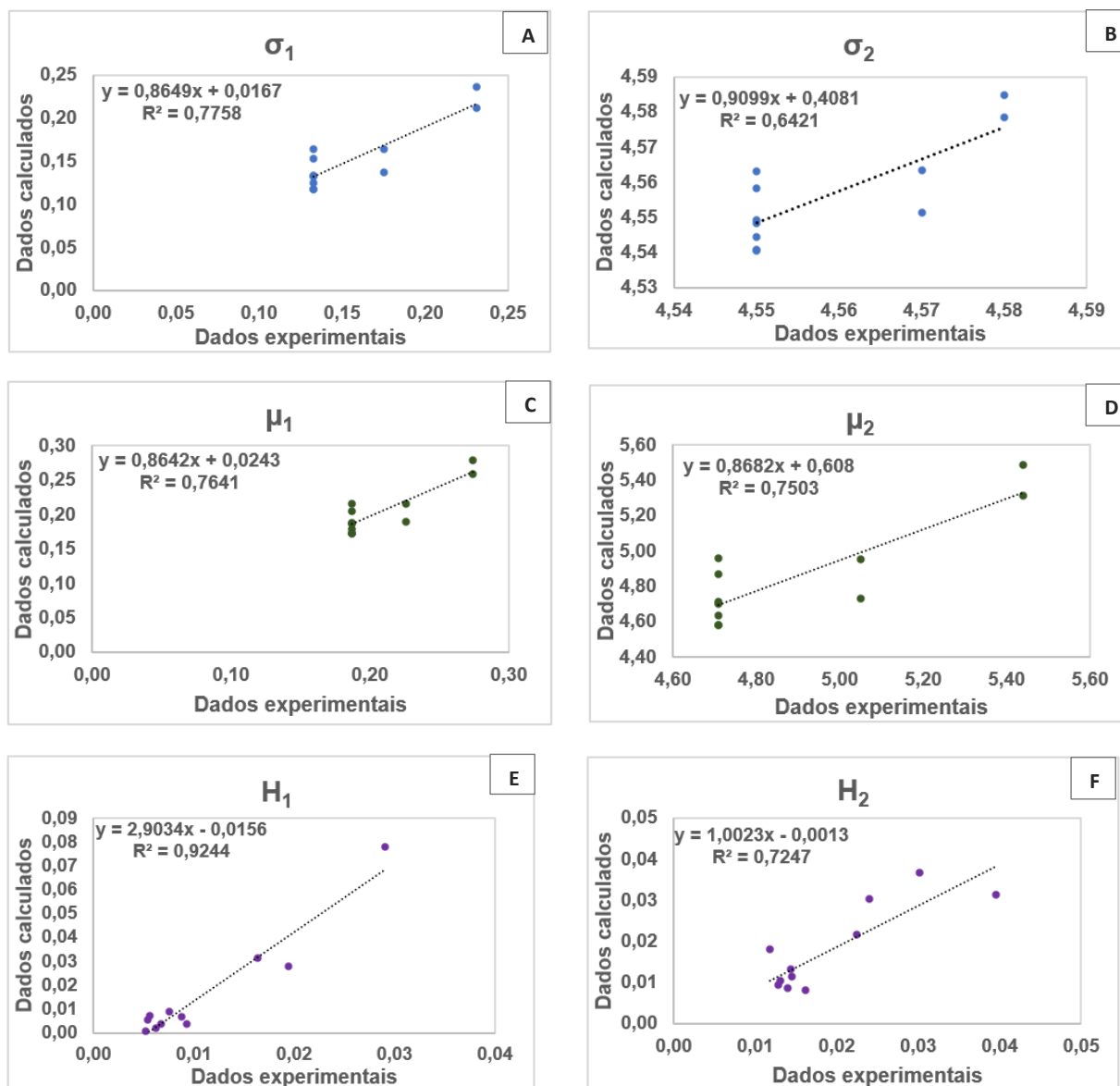


Figura 62 - Comparações entre valores experimentais e calculados pela RNA para o conjunto de testes. Legenda: (A) Desvio padrão da moda fina (σ_1), (B) Desvio padrão da moda grossa (σ_2), (C) raio médio da moda fina (μ_1), (D) raio médio da moda grossa (μ_2), (E) pico de distribuição da moda fina (H_1) e (F) pico de distribuição da moda grossa (H_2). Fonte: Própria autoria, 2020

Como visto nas figuras, o modelo se ajusta razoavelmente bem aos dados experimentais, com valores de R^2 de 0,72 a 0,82. Estes resultados podem indicar que os sinais do retroespalhamento do lidar podem ser bem correlacionados com a distribuição volumétrica de concentração de partículas de aerossol detectada pela rede AERONET para a coluna atmosférica. Para o conjunto de testes (validação do modelo), houve maior dispersão dos resultados, com R^2 variando de 0,64 a 0,92.

Esses valores mais baixos de R^2 podem ser causados pelo número relativamente baixo de dados disponíveis para validação.

A Figura 63 mostra dois exemplos dos resultados obtidos com a validação do modelo de RNA em termos de distribuição volumétrica de partículas de aerossol por classe de tamanho, para duas datas.

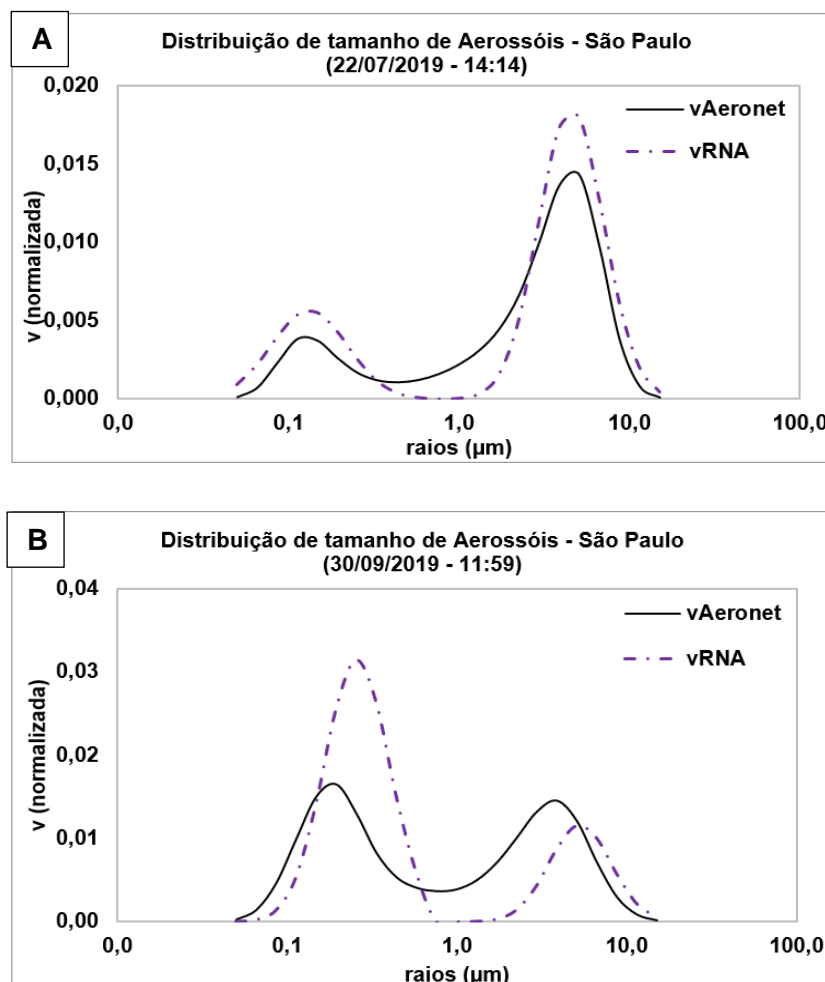


Figura 63 – Comparação entre a DTA da rede AERONET e a DTA gerada com os valores calculados pela rede neural para o conjunto de testes. Fonte: Linha contínua preta os dados estão disponíveis em https://aeronet.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/data_display_inv_v3; Linha tracejada azul - distribuição volumétrica de aerossol estimada com os parâmetros calculados pela RNA (Própria autoria, 2020).

Os resultados apresentados indicam que o modelo de rede neural é capaz de prever as distribuições bimodais do aerossol em uma estrutura computacional rápida e robusta. Porém, as discrepâncias observadas entre as distribuições $v_{AERONET}$ e v_{RNA} , como mostradas nas Figuras 63A e 63B devem ser minimizadas com uma melhoria

adicional no ajuste do modelo. Tal fato pode ser aperfeiçoado usando mais dados experimentais do sistema lidar para treinamento e teste do modelo.

9. CONCLUSÕES

No presente trabalho foram desenvolvidos dois algoritmos que utilizam técnicas de inversão, sendo os métodos de regularização de Phillips-Twomey e regularização de Veselovskii, e um algoritmo utilizando uma técnica de busca direta com otimização (Busca Direta por Otimização de Parâmetros), todos eles usados para estimar a distribuição volumétrica de concentração de tamanho de partículas aerossóis presentes na atmosfera.

Além disso, estudou-se a aplicação da técnica de redes neurais artificiais para a mesma finalidade, e, assim, analisar a possibilidade do monitoramento do lidar para obter a distribuição volumétrica de concentração de tamanho de partículas de aerossóis (DTA).

O estudo mostrou que os algoritmos que utilizam técnicas de inversão apresentaram dificuldade em estimar a DTA nos testes de validação e também quando aplicados usando coeficientes ópticos de extinção e retroespalhamento obtidos a partir de medições do sistema lidar. O algoritmo da técnica de regularização de Phillips-Twomey apresentou diferenças evidentes na estimativa das distribuições, tanto monomodais quanto bimodais, mesmo mostrando uma similaridade nos valores dos coeficientes ópticos g_{RPT} com os usados como entrada do algoritmo (g_{orig}). Essa mesma diferença foi notada quando se aplicaram os coeficientes ópticos experimentais do sistema lidar ao se comparar com a distribuição volumétrica de concentração de tamanho de aerossóis obtida pela rede AERONET. O algoritmo desenvolvido usando o método proposto por Veselovskii também apresentou resultados diferentes dos esperados para as distribuições bimodais, tanto nos testes de validação do modelo, no qual foram simuladas distribuições de tamanho “originais”, quanto na aplicação dos coeficientes ópticos experimentais do sistema lidar.

Por outro lado, o algoritmo desenvolvido para o método de Busca Direta por otimização de parâmetros mostrou-se bem mais promissor que os outros dois métodos citados. Em todos os estudos de casos para validação do algoritmo, foi possível recuperar DTA's idênticas àquelas que geraram os coeficientes de entrada do mesmo. Ao aplicar os coeficientes experimentais do sistema lidar, o algoritmo também apresentou uma boa performance, tendo sido possível estimar DTAs semelhantes às da rede AERONET, tendo sido identificados pequenos desvios em relação à concentração e raios médios das partículas.

Adicionalmente, através do estudo da técnica de rede neural artificial (RNA), verificou-se que há uma correlação do padrão de intensidade de luz retroespalhada (obtida como dado primário do sistema lidar) com parâmetros calculados a partir da DTA da coluna atmosférica, obtida pela AERONET através de um fotômetro solar. Neste caso, foi possível estimar DTA_s semelhantes às da rede AERONET ($DTA_{AERONET}$).

Portanto, conclui-se que, como os algoritmos desenvolvidos usando os métodos de regularização (RPT e VSK) apresentaram resultados diferentes dos esperados, os mesmos ainda requerem desenvolvimento adicional para que seja possível trabalhar com distribuições bimodais e, assim, aplicar aos dados experimentais do lidar. Em contrapartida, o algoritmo desenvolvido com o método de busca direta por otimização (BDO) apresentou bons resultados, ou seja, foi possível obter resultados próximos aos da rede AERONET. O mesmo pode se dizer do modelo obtido pela técnica de RNA. Porém, para um melhor treinamento da rede neural, é necessário ter um número maior de medidas do lidar concomitantes com as medições da rede AERONET.

Sendo assim, pode-se dizer que, utilizando-se ambas as técnicas (BDO e RNA) que apresentaram bons resultados, o sistema lidar mostra-se como uma alternativa promissora para o monitoramento da distribuição de concentração tamanhos de aerossóis na atmosfera em tempo real.

10. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Os produtos de distribuição de tamanho de partículas são importantes no estudo das propriedades ópticas e físicas dos componentes da atmosfera, uma vez que permite a sua classificação em termos do tipo de aerossol que está presente na atmosfera. Auxiliando assim a influência dos poluentes nos processos de mudanças climáticas. Dessa forma, a aplicação de ferramentas de sensoriamento remoto que permitem medir a distribuição vertical de aerossóis na atmosfera, combinada com ferramentas de análise de dados e métodos de inversão, que permitem calcular a distribuição de tamanho dos aerossóis em diferentes níveis de altitude da atmosfera pode auxiliar sobremaneira na diminuição das incertezas dos impactos causados por aerossóis nos eventos climáticos. Nesse contexto, como sugestão e trabalhos futuros é necessário que haja uma continuidade desse trabalho, na melhoria dos algoritmos desenvolvidos usando os métodos de regularização de RPT e VSK. Além disso, a criação de um banco de dados com coeficientes ópticos calculados a partir de medidas do fotômetro solar e, assim, desenvolver um algoritmo que compare os coeficientes ópticos estimados a partir do sistema lidar com os mesmos; uma automatização e sinergia entre os códigos de análise dos dados do lidar e da AERONET, para obter os coeficientes de retroespalhamento, extinção, razão lidar, Expoente de Angstrom e razão de retroespalhamento com mais precisão e de um modo mais simples; coletar mais dados de medidas do sistema lidar concomitantes com dados da rede AERONET para o treinamento e validação do modelo obtido a partir da técnica de RNA; desenvolver um estudo de calibração experimental do lidar, usando uma câmara com isolamento, em que se possam inserir amostras de partículas conhecidas em suspensão, e, assim, fazer medições com o sistema lidar para ter um padrão de sinais de luz retroespalhada em condições controladas; projetar um sistema lidar de medição mais compacto e de fácil manuseio, para que seja possível realizar com uma maior facilidade estudos de campo.

11.REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AEROSOL ROBOTIC NETWORK (AERONET). **AERONET Inversion Products**. Disponível em: https://aeronet.gsfc.nasa.gov/new_web/Documents/Inversion_products_V2.pdf. Acessado em: 15 ago. 2019.
- ALVES, C. Atmosféricos: Perspectiva Histórica, Fontes, Processos Químicos De Formação E Composição Orgânica. **Quim. Nova**, Vol. 28, No. 5, 859-870, 2005.
- ARGALL, P. S.; SIGA, R.J. LIDAR. **Encyclopedia of Atmospheric Sciences**. 869–889, 2002.
- ARGALL, P. S.; SIGA, R. J. **The Optics Encyclopedia: Basic Foundations and Practical Applications**. [S.l.]: Wiley Publishers, 2003. 13051322 p.
- ARSHINOV, Y.; BOBROVNIKOV, S. Use of a Fabry–Perot interferometer to isolate pure rotational Raman spectra of diatomic molecules. **Appl. Opt.** 38, 4635 (1999).
- ARTAXO, P., OLIVEIRA, P. H., LARA, L. L., PAULIQUEVIS, T. M., RIZZO, L. V, JUNIOR, C. P., AGOSTO, A. Efeitos Climáticos De Partículas De Aerossóis Biogênicos E Emitidos Em Queimadas Na Amazônia. **Revista Brasileira de Meteorologia**, 168–189. 2006.
- AMATO, U.; CARFORA, M. F.; CUOMO, V.; SERIO, C. Objective algorithms for the aerosol problem. **APPLIED OPTICS**/Vol. 34, No. 24/20 August 1995.
- ANOCHI, J. A. **Previsão climática de precipitação por redes neurais autoconfiguradas**. Tese de Doutorado do Curso de Pós-Graduação em Computação. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE). São José dos Campos, 2015.
- ANSMANN, A.; MÜLLER, D. LIDAR AND ATMOSPHERIC AEROSOL PARCLES. CAPITULO 4 - WEITKAMP, C. Lidar Range-Resolved Optical Remote Sensing of the Atmosphere. **Springer**, 2005.
- BÖCKMANN, C.; WAUER, J. The influence of spheroids on the inversion in the retrieval of microphysical particle parameters from lidar data. Optical Remote Sensing of the Atmosphere and Clouds II. **Proceedings of SPIE** Vol. 4150 (2001).

BÖCKMANN, C.; MIRONOVA, I.; MÜLLER, D.; SCHNEIDENBACH, L.; NESSLER, R. Microphysical aerosol parameters from multiwavelength lidar. **J. Opt. Soc. Am. A**/Vol. 22, No. 3. 2005.

BOHREN, C. F.; HUFFMAN, D. R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. 1. ed. New York: **John Wiley & Sons, Inc**, 1983.

BRUM, J. A. **Capítulo 3.1 - Espalhamento E Correlação**. Instituto de Física "Gleb Wataghin". Universidade Estadual de Campinas - Unicamp. 2013. Disponível em: https://sites.ifi.unicamp.br/brum/files/2014/01/FI104_JAB_1s2013_cap3.pdf.

Acessado em: 05 abr 2020.

CASTANHO, A. D. A. **Propriedades ópticas das partículas de aerossol e uma nova metodologia para a obtenção de espessura óptica via satélite sobre São Paulo**. Tese de doutorado, Instituto de Física da Universidade de São Paulo. São Paulo, 2005.

CASTRO, A. A. **Análises De Algumas Relações Entre Chuvas E Aerossóis Na Região Amazônica**. Dissertação (Mestrado em Ciências Atmosféricas). Universidade de São Paulo - Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas. Departamento de Ciências Atmosféricas. São Paulo, 2009.

CELIS, A. M. V. **Algoritmo De Ponto Interior Para Programação Linear Baseado No FDIPA**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Sistemas e Computação). COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2018.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Relatório de Qualidade do Ar - 2018**. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/ar/wp-content/uploads/sites/28/2019/07/Relatório-de-Qualidade-do-Ar-2018.pdf>. Acessado em: 02/02/2020.

CHUDZYNSKI, S.; CZYZEWSKI, A.; ERNST, K.; KARASINSKI, G.; KOLACZ, K.; PIETRUCZUK, A.; SKUBISZAK, W.; STACEWICZ, T.; STELMASZCZYK, K.; SZYMANSKI, A. Multiwavelength lidar for measurements of atmospheric aerosol. **Optics and Lasers in Engineering**, 2002.

COONEY, J.A.; ORR, J.; TOMASETTI, C. Measurements Separating the Gaseous and Aerosol Components of Laser Atmospheric Backscatte. **Nature** **224**, 1098 (1969).

COSTA, A. A.; PAULIQUEVIS, T. M.; SOUZA, E. P.; MARTINS, J. A.; YAMASOE, M.; ANDRADE, M. F.; BARBOSA, H. M. J. **CAPÍTULO 6 - Aerossóis atmosféricos e nuvens. Base científica das mudanças climáticas Volume 1 - Primeiro relatório de avaliação nacional.** COPPE. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 464 pp. 2014.

COSTA, R. S. **Influência dos aerossóis atmosféricos na quantificação do recurso energético solar: experimentos em modelo de transferência radiativa.** Tese (doutorado em Meteorologia). Instituto Nacional de Pesquisa Espaciais (INPE) – São José dos Campos, 2012.

COSTA, R. F.; LANDULFO, E. **ESTADO DA ARTE LIDAR - PARTE 1.** Centro de Lasers e Aplicação do Instituto de Pesquisas e Nucleares - IPEN.

DUBOVIK, O.; KING, M. D. A flexible inversion algorithm for retrieval of aerosol optical properties from Sun and sky radiance measurements. **Journal of Geophysical Research**, vol. 105, no. D16, 20,673–20,696 pp, AUGUST 27, 2000.

DUBOVIK, O. Optimization of Numerical Inversion in Photopolarimetric Remote Sensing, in Photopolarimetry in Remote Sensing (G. Videen, Y. Yatskiv and M. Mishchenko, Eds.), **Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Netherlands**, 65-106, 2004.

DUBOVIK, O.; SINYUK, A.; LOPYONOK, T.; HOLBEN, B. N.; MISHCHENKO, M.; YANG, P.; ECK, T. F.; VOLTEN, H.; MUNOZ, O.; VEIHELMANN, B.; VAN DER ZANDER; SOROKIN, M; SLUTSKER, I. Application of light scattering by spheroids for accounting for particle nonsphericity in remote sensing of desert dust. **Journal of Geophysical Research Atmospheres** 111. January 2006.

ECHER, E.; SOUZA, M. P; SCHUCH, N. J. A Lei de Beer Aplicada na Atmosfera Terrestre. **Revista Brasileira de Ensino de Física. Rev. Bras. Ensino Fís.** vol.23 no.3. São Paulo, 2001.

ELIÇABE, G. E.; GARCIA-RUBIO, L. H. Latex particle size distribution from turbidimetry using a combination of regularization techniques and generalized cross validation. **Advances in chemistry series**, v. 227, p. 83–104, 1990.

FABRO, J. A. **Curso de Especialização em Inteligência Computacional.** Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Agosto, 2001. Disponível em :

<http://www.dainf.ct.utfpr.edu.br/~fabro/IF67D/redesneuraisartificiais.pdf>. Acessado: 15 de Abril de 2020.

GUEDES, G. A. **Caracterização do transporte de aerossóis de poeira saariana sobre Natal-RN através da técnica de despolarização lidar**. Tese (doutor em Ciências Climáticas). Centro de Ciências Exatas e Da Terra. UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE. NATAL – RN, 2019.

GUIMARÃES, P. D.; ASSAD, E. D.; LANDAU, E. C; CORREA T. C. C. C. USO DE REDES NEURAIAS PARA A PROJEÇÃO CLIMÁTICA NO BRASIL: TEMPERATURA MÍNIMA. **SIMPÓSIO INTERNACIONAL DE CLIMATOLOGIA**, 3., 2009, Canela, RS.

GOLUB, G. H.; HEATH, M.; WAHBA, G. “Generalized crossvalidation as a method for choosing a good ridge parameter”. **Technometrics** Vol. 21, No. 2 (May, 1979), pp. 215-223.

HANSEN, P. C. The 2-norm of random matrices. **Journal of Computational and Applied Mathematics**. Volume 23, Issue 1, July 1988, Pages 117-120.

HEINTZENBERG, J. Properties of the Log-Normal Particle Size Distribution. **Aerosol Science and Technology**, 21:1, 46-48, DOI: 10.1080/02786829408959695 (1994).

HELD, G.; ALLEN, A. G.; LOPES, F. J. S.; GOMES, A. M.; CARDOSO, A. A; LANDULFO, E. Review of Aerosol Observations by Lidar and Chemical Analysis in the State of São Paulo, Brazil. Chapter 10, Atmospheric Aerosols – Regional Characteristics – Chemistry and Physics. 2012.

HINDS, W. C. **Aerosol Technology**: Properties Behavior and Measurements of Airbornes Particles. New York: New York, 1969.

KLETT, J. D. Stable analytical inversion solution for processing lidar returns. **Applied Optics**. Vol. 20, Issue 2, pp. 211-220 (1981).

KOVALEV, W. A.; EICHINGER, W. E. **Elastic Lidar: theory, practice and analysis methods**. 1st. ed. New Jersey: Wiley-Interscience Publication, 2004.

LIMA, K.; TREITZA, P.; WULDERB, M.; ST-ONGEC, B. FLOODD, M. LiDAR remote sensing of forest structure. *Progress in Physical Geography* 27,1. pp. 88–106. (2003).

LUDWIG, J. **LIDAR measurements: Determination of the aerosol extinction coefficient and comparison of incomplete overlap correction methods.** Dissertação de mestrado. Department of Physics. Ludwig Maximilians - University of Munich. 2014.

LOPES, F. J.; COSTA, R. F.; LANDULFO, E. **ESTADO DA ARTE LIDAR - PARTE 2.** Centro de Lasers e Aplicação do Instituto de Pesquisas e Nucleares - IPEN.

MARCHAND, L. **Multiplicadores de Lagrange: uma aplicação em problemas de otimização global restrita.** Trabalho de Conclusão de Curso, Matemática Aplicada Bacharelado. Universidade Federal do Rio Grande. Rio Grande, Rio Grande do Sul, 2016.

MEASURES, M. R. *Laser remote sensing: Fundamentals and applications.* Publisher: **Krieger Pub.** 1992.

MELFI, S.H. Remote Measurements of the Atmosphere Using Raman Scattering. **Applied Optics**, Vol. 11, Issue 7, pp. 1605-1610 (1972).

MÜLLER, D.; WANDINGER, U.; ANSMANN, A. Microphysical Particle Parameters from Extinction and Backscatter Lidar Data by Inversion with Regularization: Theory. **Applied Optics**, Vol. 38, No. 12/ 20. 1999.

NASA - National Aeronautics and Space Administration. **Air – Our Atmosphere.** NW-2007-8-057-GSFC. Disponível em: <https://eosps.nasa.gov/sites/default/files/publications/NASAAirPoster.pdf>. Acessado em: 25 jun 2020.

NASA - National Aeronautics and Space Administration. **Atmospheric Aerosol Properties and Climate Impacts.** U.S. Climate Change Science Program Synthesis and Assessment Product 2.3. Janeiro de 2009. Disponível em: <https://ntrs.nasa.gov/archive/nasa/casi.ntrs.nasa.gov/20090032661.pdf>. Acessado em: 25 jun 2020.

NISHIZAWA, T.; OKAMOTO, H.; SUGIMOTO, N.; MATSUI, I.; SHIMIZU, A.; AOKI, K. An algorithm that retrieves aerosol properties from dual-wavelength polarized lidar measurements. **Journal of Geophysical Research: Atmospheres**. 2007.

NEVES, J. A.; BRISTOT, G. MODELO DE PREVISÃO CLIMÁTICA BASEADO EM REDE NEURAL COM FUNÇÕES DE BASE RADIAL PARA O SEMI-ÁRIDO BRASILEIRO. **XXXVI – SBPO: O Impacto da Pesquisa Operacional nas Novas Tendências Multidisciplinares**. São João Del Rei – MG, 2004.

OLIVEIRA, A. M. **Caracterização de Profundidade Óptica de Aerossóis Atmosféricos no Nordeste Brasileiro: Um estudo através do sistema de modelagem EURAD-IM com assimilação de dados**. Tese de doutorado. Centro de Ciências exatas e da terra. Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Natal – RN, 2019.

OSTERLOH, L.; PÉREZ, P.; BÖHME, D.; BALDASANO, J. M.; BÖCKMANN, C., SCHNEIDENBACH, L.; VICENTE, D. Parallel Software for Retrieval of Aerosol Distribution from Lidar Data in the Framework of EARLINET-ASOS. **Computer Physics Communications** 180(11):2095-2102 · November 2009.

OSTERLOH, L.; BÖCKMANN, C.; MAMOURI, R. E.; PAPAYANNIS, A. An Adaptive Base Point Algorithm for the Retrieval of Aerosol Microphysical Properties, **The Open Atmospheric Science Journal**, 2011, 5: 61-73.

OSTERLOH, L.; BÖCKMANN, C.; Nicolae, D.; Nemu, A. Regularized inversion of microphysical atmospheric particle parameters: Theory and application. **Journal of Computational Physics** 237 (2013) 79–94.

PARAMESWARAN, K.; ROSE, K. O.; MURTH, B. V. Relationship between backscattering and extinction coefficients of aerosols with application to turbid atmosphere. **APPLIED OPTICS**, Vol. 30, No. 21 / 20 Jul 1991.

PHILLIPS, B.L. A technique For the numerical solution of certain integral equations of the first kind. **J. ACM** 9 (1962), 84-97. doi.org/10.1145/321105.321114.

POPE C. A. THUN, M. J.; NAMBOODIRI, M. M.; DOCKERY, D. W.; EVANS, J. S.; SPEIZER, F. E.; HEATH, C. W. **Particulate Air Pollution as a Predictor of Mortality in a Prospective Study of U.S. Adults**. *Am. J. Respir. Crit. Care. Med.*, 151: 669-674. 1995.

QING, P.; NAKANE, H.; SASANO, Y.; KITAMURA, S. Numerical simulation of the retrieval of aerosol size distribution from multiwavelength laser radar measurements. **Applied Optics** Vol. 28, Issue 24, pp. 5259-5265 (1989)

RIBEIRO, H.; ASSUNÇÃO, J. V. Efeitos das queimadas na saúde humana. **Estudos avançados**. vol.16 no.44. <http://dx.doi.org/10.1590/S0103-40142002000100008>. São Paulo Jan./Apr. 2002.

REAGAN, J. A.; THOME, K. J.; POWELL, D. M. Lidar Aerosol Ratio: Measurements and Models. **IEEE**, 0-7803-7031-7/01/ (C) 2001.

SEINFELD, J.; PANDIS, S. **Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change**. 2a. ed. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc, 2006.

SILVA, C. F. B. **Estudo comparativo de técnicas numéricas de inversão para obtenção de distribuição de tamanho de gotas em emulsões**. Dissertação de Mestrado. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. São Paulo, 2016.

SILVA, C. Q. **Redes neurais aplicadas no reconhecimento de símbolos matemáticos manuscritos online**. Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo. São Paulo, Janeiro de 2019.

SINGH, H. B. COMPOSITION, Chemistry, and climate of the atmosphere. 2: mean properties of the atmosphere. 32 p. **VAN NOSTRAND REINHOLD**, 2004.

SOUZA, R. B. **Sensoriamento Remoto: conceitos fundamentais e plataformas**. Centro Regional Sul de Pesquisas Espaciais - CRS Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE. Santa Maria, RS. 2010.

TARANTOLA, A. **Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation**. 1. ed. Philadelphia: SIAM: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2004.

TERRA, F. A. **Aplicação da curva I em problemas inversos: metodologias de extração do parâmetro ótimo de regularização**. Trabalho de conclusão de curso. Instituto de Geociências curso de Graduação em Geofísica. Universidade Federal da Bahia. Bahia, 2007.

TWOMEY, S. **Introduction to the Mathematics of Inversion in Remote Sensing and Indirect Measurements**. New York: Elsevier Science Ltd, 1977.

TWOMEY, S. On the Numerical Solution of Fredholm Integral Equations of the First Kind by the Inversion of the Linear System Produced by Quadrature*. **Mathematics, Computer Science**. Published 1963

VELHO, H. F. C. **Introdução aos Problemas Inversos**: Aplicações em Pesquisa Espacial. Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, 2008.

VESELOVSKII, I.; KOLGOTIN, A.; GRIAZNOV, V.; MÜLLER, D.; WANDINGER, U.; WHITEMAN, D. N. Inversion with regularization for the retrieval of tropospheric aerosol parameters from multiwavelength lidar sounding. **Applied optics**, v. 41, n. 18, p. 3685–99, 20 jun. 2002.

VON ZUBEN, F.; CASTRO, L. N. **Projetos de Redes Neurais**. Notas de aula IA353 - Redes Neurais. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2003a. Disponível em: http://www.dca.fee.unicamp.br/~vonzuben/courses/ia353_03.html. Acessado em: 02 abr 2020.

VON ZUBEN, F.; CASTRO, L. N. RNA, **Classificação de Padrões e Motivação Geométrica**. Notas de aula IA353 - Redes Neurais. Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2003b. Disponível em: http://www.dca.fee.unicamp.br/~vonzuben/courses/ia353_03.html. Acessado em: 02 abr 2020.

WÄCHTER, A. **An Interior Point Algorithm for Large-Scale Nonlinear Optimization with Applications in Process Engineering**. PhD thesis, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, USA, January 2002.

WÄCHTER, A. **Short Tutorial: Getting Started With Ipopt in 90 Minutes**. IBM T.J. Watson Research Center Department of Business Analytics and Mathematical Sciences. Nova Iorque, 2009. Disponível em: <https://drops.dagstuhl.de/volltexte/2009/2089/pdf/09061.WaechterAndreas.Paper.2089.pdf>. Acessado em: 12 mar 2020.

WANDINGER, U. introduction to LIDAR. Introduction - WEITKAMP, C. **Lidar Range-Resolved Optical Remote Sensing of the Atmosphere**. Springer, 2005.

WANG, F.; LIU, X.; CAI, Y. PROPAGATION OF PARTIALLY COHERENT BEAM IN TURBULENT ATMOSPHERE: A REVIEW (Invited Review). Progress In **Electromagnetics Research**, Vol. 150, 123-143, 2015.

WEITKAMP, C. **Lidar Range-Resolved Optical Remote Sensing of the Atmosphere**. Springer, 2005.

WHITBY, K. The Physical Characteristics of Sulfur Aerosols. **Atmospheric Environment**, 12, 135-159. (1978).

WOLFENBARGER, J. K.; SEINFELD, J. H. Inversion of aerosol size distribution data. **Journal of Aerosol Science**, Volume 21, Issue 2, 1990, Pages 227-247

VON ZUBEN, F. J. **Modelos paramétricos e não paramétricos de redes neurais artificiais e aplicações**. Tese (doutorado em Engenharia Elétrica), Universidade Estadual de Campinas - Unicamp. Campinas, 1996.

APÊNDICE A - EQUACIONAMENTO DA TEORIA DE MIE

Segundo SEINFELD et al. (2006), os parâmetros que governam o espalhamento e absorção de luz em partículas esféricas são - o comprimento de onda da radiação incidente, λ ; o tamanho da partícula adimensional, w , que é a razão entre o diâmetro da partícula e o λ (A1); e o índice de refração com os termos real e imaginário (A2).

$$w = \frac{\pi D_a}{\lambda} \quad (\text{A1})$$

$$m = n + ik \quad (\text{A2})$$

Onde: n é o índice de refração real e k o coeficiente de absorção da partícula (parte imaginária $i = \sqrt{-1}$).

O índice de refração complexo, m , é a relação entre a velocidade da luz no vácuo, c , e a velocidade em que a luz passa por uma partícula.

Em um determinado λ a distribuição angular da intensidade da radiação espalhada por uma partícula, é denominada de “função de fase” ou “fase de espalhamento”, definida como a intensidade dispersa em um ângulo θ em relação ao feixe incidente e, normalizada pela integral da intensidade espalhada em todos os ângulos (SEINFELD et al., 2006).

$$P(\theta, m, w) = \frac{F(\theta, w, m)}{\int_0^\pi F(\theta, w, m) \sin\theta \, d\theta} \quad (\text{A3})$$

Onde $F(\theta, w, m)$ é a intensidade de luz espalhada no ângulo θ .

Um outro método de quantificar a distribuição da intensidade da luz espalhada é a razão de “retroespalhamento hemisférica” ou simplesmente “razão de retroespalhamento”, B . A qual é definida pela intensidade espalhada que é redirecionada para o hemisfério anterior da partícula, ou seja, retroespalhamento. Apresentada pela Equação A4.

$$B = \frac{\int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} P(\theta, m, w) \sin \theta d\theta}{\int_0^{\pi} P(\theta, w, m) \sin \theta d\theta} \quad (\text{A4})$$

Segundo SEINFELD et al. (2006) é possível determinar as eficiências de extinção, Q_{exp} , e espalhamento, Q_{esp} , Mie a partir das Equações A5 e A6, respectivamente.

$$Q_{\text{ext}}(w, m) = \frac{2}{w^2} \sum_{k=1}^{\infty} (2k + 1) [|a_k|^2 + |b_k|^2] \quad (\text{A5})$$

$$Q_{\text{esp}}(w, m) = \frac{2}{w^2} \sum_{k=1}^{\infty} (2k + 1) \text{Re}[a_k + b_k] \quad (\text{A6})$$

Onde k é o número de iterações e os coeficientes de Mie, a_k e b_k são definidos a partir das equações A7 e A8, respectivamente.

$$a_k = \frac{\alpha \psi'_k(y) \psi_k(\alpha) - y \psi'_k(\alpha) \psi_k(y)}{\alpha \psi'_k(y) \xi_k(\alpha) - y \xi'_k(\alpha) \psi_k(y)} \quad (\text{A7})$$

$$b_k = \frac{y \psi'_k(\alpha) \psi_k(y) - \alpha \psi'_k(y) \psi_k(\alpha)}{y \xi'_k(\alpha) \psi_k(y) - \alpha \psi'_k(y) \xi_k(\alpha)} \quad (\text{A8})$$

No qual $y = wm$ e as função Riccati- Bessel, $\psi_k(w)$ e $\zeta_k(w)$ são dadas pelas Equações A9 e A10, respectivamente.

$$\psi_k(w) = \left(\frac{\pi w}{2}\right)^{\frac{1}{2}} J_{k+\frac{1}{2}}(w) \quad (\text{A9})$$

$$\zeta_k(w) = \left(\frac{\pi w}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left[J_{k+\frac{1}{2}}(w) + i(-1)^k J_{-k-\frac{1}{2}}(w) \right] \quad (\text{A10})$$

O algoritmo para o cálculo dos coeficientes a_k e b_k está apresentado a seguir,

$$a = \frac{\left(\frac{A_k(y)}{m} + \frac{k}{w}\right) \text{Re}[\zeta_k(w)] - \text{Re}[\zeta_{k-1}(w)]}{\left(\frac{A_k(y)}{m} + \frac{k}{w}\right) [\zeta_k(w)] - [\zeta_{k-1}(w)]} \quad (\text{A11})$$

$$b = \frac{\left(A_k(y) m + \frac{k}{w}\right) \text{Re}[\zeta_k(w)] - \text{Re}[\zeta_{k-1}(w)]}{\left(A_k(y) m + \frac{k}{w}\right) [\zeta_k(w)] - [\zeta_{k-1}(w)]} \quad (\text{A12})$$

Onde o termo A_k é encontrado a partir da equação A13. E o termo de ζ_k estimados pelas equações A14,15 e 16.

$$A_k(y) = -\frac{k}{y} + \left(\frac{k}{y} - A_{k-1}(y)\right)^{-1} \quad (\text{A13})$$

$$\zeta_k(w) = \frac{2k-1}{w} \zeta_{k-1}(w) - \zeta_{k-2}(w) \quad (\text{A14})$$

$$\zeta_0(w) = \text{sen}(w) - i\text{cos}(w) \quad (\text{A15})$$

$$\zeta_{-1}(w) = \text{cos}(w) - i\text{sen}(w) \quad (\text{A16})$$