

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-5539-TDI/527

Estudo de Ondas de Gravidade na Alta
Atmosfera através de Observações de
Luminescência Atmosférica da Hidroxila
OH (9 – 4) e Oxigênio O₂ (0 – 1)

Delano Gobbi

São José dos Campos
Maio de 1993

52-852

GOBBI, D.

Estudo de ondas de gravidade na alta atmosfera através de observações de luminescência atmosférica da hidroxila OH(9-4) e oxigênio O₂(0-1) / D. Gobbi. -- São José dos Campos : INPE, 1993.

230p. - (INPE-5539-TDI/527)

1. Ondas de gravidade. 2. Luminescência atmosférica. I. Título.

**Estudo de Ondas de Gravidade na Alta
Atmosfera através de Observações de
Luminescência Atmosférica da Hidroxila
OH (9 – 4) e Oxigênio O₂ (0 – 1)**

Delano Gobbi

Tese de Doutorado em Ciência Espacial, orientada pelo Dr. Hisao
Takahashi e Dr. Paulo Prado Batista, aprovada em Junho de 1993

INPE

São José dos Campos

Janeiro de 1994

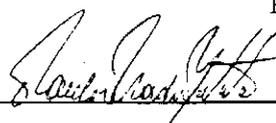
Aprovada pela Banca Examinadora
em cumprimento a requisito exigido
para a obtenção do Título de Doutor
em Ciência Espacial

Dr. Barclay Robert Clemesha



Presidente

Dr. Paulo Prado Batista



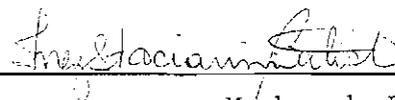
Orientador

Dr. Hisao Takahashi



Orientador

Dra. Inez Staciarini Batista



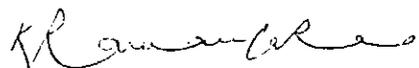
Membro da Banca

Dra. Iara Regina Cardoso de Almeida Pinto



Membro da Banca

Dr. Kalvala Ramanuja Rao



Membro da Banca
- Convidado -

Dr. Oswaldo Massambani



Membro da Banca
- Convidado -

Candidato: Delano Gobbi

São José dos Campos, 28 de junho de 1993

*Aos meus pais, Benito e Elita
e a Vanildes.*

AGRADECIMENTOS

O autor agradece, em especial, ao Hisao Takahashi, Paulo Prado Batista e Barclay Robert Clemenha por terem-no introduzido aos enigmas da atmosfera superior; ao pessoal da área científica e técnica do INPE, pela orientação e apoio durante o desenvolvimento deste trabalho.

Este estudo foi financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

RESUMO

Neste trabalho, são examinados os efeitos das ondas de gravidade sobre as emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$ presentes no *nightglow* (luminescência atmosférica noturna) da região da mesopausa (entre 80 a 100 km). O trabalho compõe-se de duas partes: a análise espectral das flutuações quase-periódicas nas intensidades de *nightglow* (taxas de emissão aparente) e temperaturas rotacionais, proporcionadas pelo experimento MULTI2, e uma interpretação teórica destas medidas, baseada em um modelo fotoquímico-dinâmico de uma atmosfera com efeitos difusivos. Admite-se que os eventos ondulatórios nas intensidades e nas temperaturas das bandas de emissão sejam resultados de mudanças na camada de *airglow* geradas pela passagem de ondas de gravidade. A razão de Krassovsky η , quociente entre a fração das flutuações da taxa de emissão e temperatura, é o parâmetro utilizado para comparar os valores teóricos aos observacionais. Com relação à emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, doze eventos com ondas monocromáticas foram analisados, possuindo períodos aparentes entre 42 min e 142 min. As medidas das amplitudes de $\eta_{O_2(b)}$ exibiram uma tendência de crescimento em períodos de onda longos concordando com as predições do modelo. As medidas da fase de $\eta_{O_2(b)}$ foram positivas e próximas a zero, também em acordo com o modelo presente. No caso da emissão de $OH^*(9-4)$, oito eventos com ondas monocromáticas foram pesquisados, com períodos aparentes entre 41 min e 126 min. Os valores de η_{OH^*} estão em concordância com o modelo, principalmente em períodos de onda longos. Este trabalho ressalta a importância de realizarem-se medidas conjuntas da estrutura horizontal das flutuações, bem como da velocidade dos ventos (efeito Doppler) na região da mesopausa.

Study of gravity wave in the upper atmosphere via $\text{OH}^*(9-4)$ and $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ bands nightglow observations

ABSTRACT

In this thesis, the effects of gravity waves on the $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ and $\text{OH}^*(9-4)$ *nightglow* emissions in the mesopause region (between 80 to 100 km) were examined. The study consists of two parts: spectral analysis of the quasi-periodic fluctuations in the intensities (apparent emission rate) and rotational temperatures, collected by MULTI2 experiment, and theoretical interpretation of the results from the data, on the basis of photochemical-dynamic atmospheric model with the inclusion of dissipation. Wave-like events in the band emission intensities and temperatures are assumed to be a consequence of changes of *airglow* layer by gravity waves. The Krassovsky's ratio η , quantitative relation of the fractional fluctuations in the emission rate and temperature, is the parameter used to compare model calculations and observed values. In reference to $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ emission, a total of twelve wave-like events were found, with apparent periods of 42 min and 142 min. The observed amplitudes $\eta_{\text{O}_2(b)}$ showed an increased trend on the long wave periods, in accordance with the predicted calculations. The fluctuations of the temperature and the emission rate were mostly in phase, which is expected from model predictions. Regarding the $\text{OH}^*(9-4)$ emission, eight wave-like events were found, with apparent periods of 41 min and 126 min. The observed η_{OH^*} are in agreement with the model calculations, mainly for long wave periods. This study demonstrated that measurements of η must be made in conjunction with observations of horizontal structure of wave, in addition to the background wind (Doppler shift) in that region.

SUMÁRIO

	Pág.
LISTA DE FIGURAS	xv
LISTA DE TABELAS	xxi
LISTA DE SÍMBOLOS	xxiii
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - SISTEMA ATMOSFÉRICO O₂	7
2.1 - Espectroscopia do sistema atmosférico O ₂	8
2.1.1 - Modelo vetorial para moléculas diatômicas	8
2.1.2 - Transições eletrônicas no O ₂	9
2.2 - Temperatura rotacional da banda O ₂ (0-1)	16
2.3 - Fotoquímica do sistema atmosférico O ₂	18
CAPÍTULO 3 - BANDAS DE MEINEL OH* (v ≤ 9)	21
3.1 - Espectroscopia das bandas de Meinel	21
3.2 - Temperatura rotacional da banda OH (9-4)	25
3.3 - Fotoquímica das bandas de Meinel	28
CAPÍTULO 4 - AQUISIÇÃO E REDUÇÃO DOS DADOS	31
4.1 - Breve descrição do MULTI2	32
4.2 - Calibração	33
4.2.1 - Curvas de transmitância	33
4.2.2 - Sensibilidade absoluta	34
4.3 - Cálculo da temperatura rotacional	37
4.3.1 - Filtro F4 — OH* (9-4)	38
4.3.2 - Filtro F5 — O ₂ (b ¹ Σ _g ⁺ , 0-1)	41
4.4 - Contaminação espectral	44
4.5 - Confiabilidade e precisão das medidas	46
4.5.1 - Erro associado aos fatores experimentais	46
4.5.2 - Erro associado aos fatores teóricos	47
4.5.3 - Erro nas medidas de B e T	47
4.5.4 - Erro no cálculo de η	48

CAPÍTULO 5 - DADOS DO MULTI2. PARTE I: TAXAS DE EMISSÃO E TEMPERATURAS	49
5.1 - Coleta de dados: Preliminares	49
5.2 - Resultados I: Taxas de emissão e temperaturas	50
CAPÍTULO 6 - DADOS DO MULTI2. PARTE II: A PRESENÇA DE ONDAS DE GRAVIDADE NAS EMISSÕES DE $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ E $OH^*(9-4)$	73
6.1 - Algoritmo para análise do espectro das ondas	74
6.1.1 - O método da entropia máxima (MEM)	74
6.1.2 - Estimativa dos mínimos quadrados da amplitude e fase	79
6.2 - Medida de η	82
6.3 - Resultados II: η calculado através das observações	85
CAPÍTULO 7 - TEORIA DA RELAÇÃO ENTRE AO ONDAS DE GRAVIDADE E O AIRGLOW DE $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ E $OH^*(9-4)$	103
7.1 - Relações de dispersão e polarização para as ondas de gravidade planas	104
7.2 - Perturbações ondulatórias na química dos constituintes minoritários	117
7.2.1 - Linearização do coeficiente cinético	118
7.2.2 - Linearização da equação da continuidade	119
7.3 - Expressão analítica para η	120
7.3.1 - Modelo fotoquímico para o $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$	123
7.3.2 - Modelo fotoquímico para o $OH^*(9-4)$	127
7.4 - Análise quantitativa de η	130
7.4.1 - Modelo de camada simples — cálculo de η	132
7.4.2 - Modelo de múltiplas camadas — cálculo de η	143
7.5 - Comparações com as observações	150
7.5.1 - Comparação com as observações do MULTI2	150
7.5.2 - Comparação com as observações de Viereck e Deehr	155
7.5.3 - Comparação com as observações de Zhang	157
7.6 - Comparação com a teoria semi-Lagrangiana de Hines e Tarasick	158
CAPÍTULO 8 - CONCLUSÃO	161
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	165
APÊNDICE A - PROGRAMAS DE COMPUTADOR	173

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
2.1 - A precessão do momento angular orbital L e spin S sobre o eixo internuclear (considerado aqui, por simplicidade, fixo no espaço) de uma molécula diatômica.	8
2.2 - Diagrama parcial das curvas de energia potencial de O_2 e a nomenclatura das transições eletrônicas entre os vários estados.	11
2.3 - Diagramas vetoriais para os dois casos limites do acoplamento $S - L$, conforme a teoria de Hund.	12
2.4 - Diagrama vibracional-rotacional entre os estados eletrônicos $^1\Sigma_g^+ - ^3\Sigma_g^-$ de O_2	14
2.5 - Espectro teórico da banda (0-1) do sistema atmosférico.	17
2.6 - Perfis observados da banda atmosférica (0-0), provenientes de diferentes experimentos de foguetes e efetuados em diferentes localizações geográficas.	20
3.1 - Transições eletrônicas observadas no OH.	22
3.2 - Os níveis vibracionais e rotacionais de $OH(X^2\Pi_i)$	24
3.3 - Espectro teórico da banda de Meinel (9-4).	27
3.4 - Distribuição em altitude da densidade de $OH(\nu)$	30
4.1 - Diagrama de blocos do fotômetro multicanal MÚLTI2.	32
4.2 - Montagem experimental usada para determinar a sensibilidade absoluta.	35
4.3 - Espectro do $OH^*(9-4)$ e as curvas de transmitância.	38
4.4 - Polinômios de ajuste $T = T(\mathcal{M}_{R,Q})$ e $\mathcal{SM}_Q = \mathcal{SM}_Q(T)$, no caso da banda $OH^*(9-4)$	40
4.5 - Espectro do $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e as curvas de transmitância.	41
4.6 - Polinômios de ajuste $T = T(\mathcal{M}_{P+Q})$ e $\mathcal{SM}_{P+Q} = \mathcal{SM}_{P+Q}(T)$, no caso da banda $O_2(0-1)$	43
4.7 - O comportamento de $G(\lambda)$ e da resposta fotométrica.	45
5.1 - Taxas de emissão médias e temperaturas médias da emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ entre 23 horas e 5 horas (tempo local).	53
5.2 - A temperatura rotacional média em função da taxa de emissão média de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$	54
5.3 - Os dados do MÚLTI2 convertidos em temperaturas rotacionais e taxas de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)(0-1)$, e os coeficientes de correlação cruzada entre estas duas variáveis, referentes ao <i>nightglow</i> de 23/24 de abril de 1990.	55

5.4 - Idem à Figura 5.3, para o <i>nightglow</i> de 25/26 de abril de 1990.	56
5.5 - Idem à Figura 5.3, para o <i>nightglow</i> de 23/24 de maio de 1990.	57
5.6 - Idem à Figura 5.3, para o <i>nightglow</i> de 26/27 de maio de 1990.	58
5.7 - Idem à Figura 5.3, para o <i>nightglow</i> de 21/22 de junho de 1990.	59
5.8 - Idem à Figura 5.3, para o <i>nightglow</i> de 24/25 de junho de 1990.	60
5.9 - Idem à Figura 5.3, para o <i>nightglow</i> de 16/17 de setembro de 1990.	61
5.10 - Idem à Figura 5.3, para o <i>nightglow</i> de 14/15 de novembro de 1990.	62
5.11 - Idem à Figura 5.3, para o <i>nightglow</i> de 21/22 de novembro de 1990.	63
5.12 - Temperaturas e taxas de emissão médias da emissão de OH* (9-4) entre 23.5 horas e 5 horas (tempo local).	65
5.13 - A temperatura média em função da taxa de emissão média de OH* (9-4).	66
5.14 - Os dados do MULTI2 convertidos para as temperaturas rotacionais e taxas de emissão de OH* (9-4), e os coeficientes de correlação cruzada entre estas duas variáveis, referentes ao <i>nightglow</i> de 29/30 de janeiro de 1990.	67
5.15 - Idem à Figura 5.14, para o <i>nightglow</i> de 21/22 de junho de 1990.	68
5.16 - Idem à Figura 5.14, para o <i>nightglow</i> de 23/24 de junho de 1990.	69
5.17 - Idem à Figura 5.14, para o <i>nightglow</i> de 20/21 de novembro de 1990.	70
5.18 - Idem à Figura 5.14, para o <i>nightglow</i> de 17/18 de abril de 1991.	71
6.1 - Taxa de emissão relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ observada na noite de 25/26 de abril de 1990.	78
6.2 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ para a noite de 25/26 de abril de 1990, usando valores diferentes de M	79
6.3 - Curva de ajuste sobreposta à taxa de emissão relativa observada de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, na noite de 25/26 de abril de 1990.	81
6.4 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ para a noite de 25/26 de abril de 1990.	83
6.5 - Curva de ajuste sobreposta à temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, na noite de 25/26 de abril de 1990.	84
6.6 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 23/24 de abril de 1990.	86
6.7 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 23/24 de abril de 1990.	86

6.8 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 23/24 de maio de 1990.	87
6.9 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 23/24 de maio de 1990.	87
6.10 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 26/27 de maio de 1990.	88
6.11 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 26/27 de maio de 1990.	88
6.12 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 21/22 de junho de 1990.	90
6.13 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 21/22 de junho de 1990.	90
6.14 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 24/25 de junho de 1990.	91
6.15 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 24/25 de junho de 1990.	91
6.16 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 16/17 de setembro de 1990.	92
6.17 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 16/17 de setembro de 1990.	92
6.18 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 14/15 de novembro de 1990.	93
6.19 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 14/15 de novembro de 1990.	93
6.20 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 21/22 de novembro de 1990.	94
6.21 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 21/22 de novembro de 1990.	94
6.22 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $OH^*(9-4)$ na noite de 29/30 de janeiro de 1990.	96

6.23 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de OH* (9-4) na noite de 29/30 de janeiro 1990.	96
6.24 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de OH* (9-4) na noite de 21/22 de junho de 1990.	97
6.25 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de OH* (9-4) na noite de 21/22 de junho de 1990.	97
6.26 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de OH* (9-4) na noite de 23/24 de junho de 1990.	98
6.27 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de OH* (9-4) na noite de 23/24 de junho de 1990.	98
6.28 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de OH* (9-4) na noite de 20/21 de novembro de 1990.	99
6.29 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de OH* (9-4) na noite de 20/21 de novembro de 1990.	99
6.30 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de OH* (9-4) na noite de 17/18 de abril de 1991.	100
6.31 - Curva de ajuste sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de OH* (9-4) na noite de 17/18 de abril de 1991.	100
7.1 - O comprimento de onda vertical <i>versus</i> período, calculado sem dissipação e com dissipação, para diferentes $\lambda_x = 200, 500, 1000, 1500$ e 2000 km, avaliado em 90 km.	110
7.2 - O fator de atenuação α <i>versus</i> período, calculado sem dissipação e com dissipação, para diferentes $\lambda_x = 200, 500, 1000, 1500$ e 2000 km, avaliado em 90 km.	111
7.3 - Magnitude e fase do fator de polarização f_3 <i>versus</i> período, calculado com dissipação de <i>eddy</i> e sem dissipação <i>eddy</i> (linha sólida), para diferentes valores de $\lambda_x = 200, 500, 1000, 1500$ e 2000 km, avaliados em 90 km.	114
7.4 - Idêntica à Figura 7.3, mas referida ao fator de polarização f_2	115
7.5 - Idêntica à Figura 7.3, mas referida ao fator de polarização f_1	116
7.6 - A magnitude e a fase do fator de polarização f_6 do oxigênio atômico <i>versus</i> período intrínseco da onda, calculados para uma atmosfera com e sem efeitos dissipativos, para dois valores distintos de λ_x	125

7.7 - A magnitude e a fase do fator de polarização f_6 do oxigênio atômico, hidrogênio atômico, ozônio e hidroxila <i>versus</i> período intrínseco da onda, calculados para uma atmosfera com e sem efeitos dissipativos, para dois valores distintos de λ_x	129
7.8 - Perfis em altitude das densidades numéricas básicas das espécies atmosféricas (Hedin, 1987 e Rodrigo <i>et al.</i> 1991).	131
7.9 - Resultados das amplitudes de $\eta_{O_2(b)} = \chi_{O_2(b)}$ para um modelo de camada simples, em diferentes níveis de altitude de 93 km, 94 km e 95 km, em uma atmosfera com presença e ausência de efeitos difusivos, usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km.	134
7.10 - Resultados das fases de $\eta_{O_2(b)} = \chi_{O_2(b)}$ para um modelo de camada simples, em diferentes níveis de altitude de 93 km, 94 km e 95 km, em uma atmosfera com presença e ausência de efeitos difusivos, usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km.	135
7.11 - O mesmo da Figura 7.9, com o número de <i>quenching</i> nulo ($\alpha_o = 0$), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 1000 km e 2000 km.	136
7.12 - O mesmo da Figura 7.10, com o número de <i>quenching</i> nulo ($\alpha_o = 0$), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 1000 km e 2000 km.	137
7.13 - Resultados das amplitudes de $\eta_{OH^*} = \chi_{OH^*}$ para um modelo de camada simples, em diferentes níveis de altitude de 87 km, 88 km e 89 km, em uma atmosfera com presença e ausência de efeitos difusivos, usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km.	139
7.14 - Resultados das fases de $\eta_{OH^*} = \chi_{OH^*}$ para um modelo de camada simples, em diferentes níveis de altitude de 87 km, 88 km e 89 km, em uma atmosfera com presença e ausência de efeitos difusivos, usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km.	140
7.15 - O mesmo da Figura 7.13, com os números de <i>quenching</i> nulos ($\alpha_o = 0$ e $\beta_o = 0$), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 1000 km e 2000 km.	141
7.16 - O mesmo da Figura 7.14, com os números de <i>quenching</i> nulos ($\alpha_o = 0$ e $\beta_o = 0$), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 1000 km e 2000 km.	142
7.17 - Taxas volumétricas de emissão para as emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, calculadas a partir do modelo básico de constituintes adotados no presente trabalho.	144
7.18 - Efeitos de interferência — resultados das amplitudes e fases de $\eta_{O_2(b)}$ para um modelo de múltiplas camadas, considerando uma camada de emissão de $z_i = 88$ km e $z_s = 102$ km, em uma atmosfera com presença e ausência de efeitos difusivos, usando $\lambda_x = 200$ km.	146

7.19 - Efeitos de interferência — resultados das amplitudes e fases de η_{OH^*} para um modelo de múltiplas camadas, considerando uma camada de emissão de $z_i = 81$ km e $z_s = 95$ km, em uma atmosfera com presença e ausência de efeitos difusivos, usando $\lambda_x = 200$ km.	147
7.20 - Os resultados das amplitudes e fases de $\eta_{O_2(b)}$ para um modelo de múltiplas camadas, considerando uma camada de emissão de $z_i = 88$ km e $z_s = 102$ km, em uma atmosfera com presença e ausência de efeitos difusivos.	148
7.21 - Os resultados das amplitudes e fases de η_{OH^*} para um modelo de múltiplas camadas, considerando uma camada de emissão de $z_i = 81$ km e $z_s = 95$ km, em uma atmosfera com presença e ausência de efeitos difusivos.	149
7.22 - A comparação entre os resultados das amplitudes e fases de $\eta_{O_2(b)}$ inferidos das observações proporcionadas pelo MULTI2 e as predições teóricas do presente estudo.	153
7.23 - A comparação entre os resultados das amplitudes e fases de η_{OH^*} inferidos das observações proporcionadas pelo MULTI2 e as predições teóricas do presente estudo.	154
7.24 - A comparação entre os resultados de η_{OH^*} obtidos das observações de Viereck e Deehr (1989) e as predições teóricas do presente estudo.	156
7.25 - Comparação dos resultados de η , referente às emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, calculados através da descrição Euleriana apresentada neste trabalho e da descrição semi-Lagrangiana desenvolvida por Hines e Tarasick (1987).	159

LISTA DE TABELAS

	Pág.
2.1 - Constantes moleculares para o sistema atmosférico.	15
2.2 - O espectro- λ (nm) do sistema atmosférico O_2 (0-1) corrigido ao ar.	15
3.1 - Os termos vibracionais e as constantes da molécula OH.	23
3.2 - O espectro- λ (nm) da banda de Meinel (9-4) corrigido ao ar.	25
4.1 - Resultados da calibração do MULTI2.	37
5.1 - Taxas de emissão e temperaturas de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ E $OH^*(9-4)$ medidas pelo MULTI2.	51
6.1 - Amplitude e fase de cada modo de propagação presentes na taxa de emissão relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, na noite de 25/26 de abril de 1990.	81
6.2 - Amplitude e fase de cada modo de propagação presentes na temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, na noite de 25/26 de abril de 1990.	83
6.3 - Valores de η proveniente das medidas de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$	101
6.4 - Valores de η provenientes das medidas de $OH^*(9-4)$	102
7.1 - Reações e coeficientes cinéticos relativos à excitação de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$	123
7.2 - Reações e coeficientes cinéticos relativos à excitação de $OH^*(9-4)$	127
7.3 - Comparação entre os valores de $\eta_{O_2(b)}$ observados por Zhang (1991) e preditos pela teoria usada neste trabalho.	157

LISTA DE SÍMBOLOS

a, k, K	- Coeficientes cinéticos de reação (reações bimoleculares em molec. $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$; reações trimoleculares em molec. $\text{cm}^6 \text{s}^{-1}$)
a, b, c, A', A, X	- Designação das transições eletrônicas na molécula do oxigênio
a, b, c	- Coeficientes estequiométricos de reação (adim)
a	- Coeficientes autoregressivos do filtro de erro de previsão (produzido pelo MEM)
A_p	- Índice geomagnético (adim)
A_k	- Fatores experimentais definidos pela equação (4.21) (adim)
A, B, C, X	- Designação das transições eletrônicas na molécula de OH.
A	- Coeficiente de Einstein (s^{-1})
A	- Medida de uma superfície (m^{-2})
A_v	- Constante de acoplamento spin-momento angular (cm^{-1})
B	- Taxa de emissão aparente ou intensidade de <i>nightglow</i> (R)
$B_{v, e}$	- Constantes rotacionais (cm^{-1})
c	- Velocidade da luz no vácuo (m s^{-1})
C	- Velocidade do som no fluido (cm s^{-1})
C	- Parâmetros de McDade (coeficientes de <i>quenching</i>)
C	- Constante instrumental dimensional definida na equação (4.2)
C_v	- Concentração total das moléculas no nível $v = 0$ (cm^{-3})
d	- Distância geométrica (m)
$D_{v, e}$	- Constantes rotacionais — efeito centrífugo (cm^{-1})
$e(\lambda)$	- Eficiência quântica da fotomultiplicadora (adim)
e	- Erros residuais (produzidos pelo MEM)
E	- Irradiância (W cm^{-2})
f	- Freqüência (s^{-1})
f	- Fatores de polarização (f_1 em s^{-1} ; f_2 e f_5 em cm s^{-1} ; $f_3, f_4,$ e f_6 : adimensionais)
f	- Fator de Herman-Wallis
F	- Termo de energia rotacional (cm^{-1})
$g = (0, 0, -g)$	- Aceleração da gravidade (cm s^{-2});
G	- Intensidade da radiação de fundo (R)

G	- Termo de energia vibracional (cm^{-1})
h	- Constante de Planck (J s^{-1})
H	- Altura de escala (cm)
$H_{v, e}$	- Constantes rotacionais — efeito de ordem superior (cm^{-1})
i	- Intensidade espectroscópica relativa (adim)
I	- Intensidade espectroscópica ($\text{fótons s}^{-1} \text{cm}^{-3}$)
J	- Resposta do fotômetro (pulsos s^{-1})
\mathbf{J}	- Vetor momento angular total de uma molécula, incluindo a rotação nuclear
J	- Número quântico relacionado à \mathbf{J}
$\mathbf{k} = (k_x, 0, k_z)$	- Vetor número de onda real (cm^{-1})
k_B	- Constante de Boltzmann (J K^{-1})
$K(\lambda)$	- Reflectância (adim)
\mathbf{K}	- Vetor momento angular total, excluindo spin
K	- Número quântico relacionado à \mathbf{K}
ℓ	- Razão $\rho/n(\text{O}_2)$ (adim)
\mathbf{L}	- Vetor momento angular orbital dos elétrons
L	- Termo de perda fotoquímica ($\text{molec. cm}^{-3} \text{s}^{-1}$)
L	- Radiância ($\text{W cm}^{-2} \text{sr}^{-1}$)
$\mathbf{m} = (m_x, 0, m_z)$	- Vetor número de onda complexo (cm^{-1})
M	- Ordem do filtro de predição (produzido pelo MEM)
M	- Molécula média do ar mesosférico
n	- Densidade numérica de um determinado constituinte minoritário (molec. cm^{-3})
\mathbf{N}	- Vetor momento angular nuclear
N	- Número de pontos de uma série temporal genérica
p	- Pressão por unidade de massa ($\text{cm}^{-1} \text{s}^{-2}$)
P	- Termo de produção fotoquímica ($\text{molec. cm}^{-3} \text{s}^{-1}$)
P	- Potência espectral (produzida pelo MEM)
P, Q, R	- Designação de diferentes ramos rotacionais presentes no espectro de uma molécula excitada
Q	- Termo de fonte fotoquímica ($\text{molec. cm}^{-3} \text{s}^{-1}$)
Q	- Função partição rotacional (adim)
r	- Coeficiente de correlação cruzada (adim)

r^2	- Coeficiente de correlação múltipla
r	- Razão entre a constante dos gases perfeitos e o peso molecular médio da atmosfera ($\text{cm}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$)
R	- Separação internuclear dos níveis de energia (Å)
S	- Função peso ou fator de intensidade (adim)
\mathbf{S}	- Vetor momento angular de spin
S	- Número quântico associado à \mathbf{S} .
S	- Sensibilidade fotométrica ($\text{R}^{-1} \text{s}^{-1}$)
S_x	- Densidade espectral (produzida pelo MEM)
$\mathcal{S}, \mathcal{SM}$	- Razão entre as intensidades dos ramos rotacionais (adim)
t	- Transmitância relativa (adim)
t	- Tempo (s)
T	- Função transmitância do filtro (adim)
T	- Temperatura rotacional ou temperatura cinética do gás ambiente (K)
T_m	- Temperatura rotacional medida pelo MULTI2 (K)
$\mathbf{v} = (u, 0, w)$	- Velocidade do fluido (cm s^{-1})
v	- Número quântico vibracional
V	- Função de energia potencial (eV)
w	- Janela espectral
\mathbf{x}	- Coordenadas espaciais (m)
$\mathbf{x} = (x, 0, z)$	- Coordenadas cartesianas (cm)
Y_v	- Razão entre A_v e D_v (adim)
α	- Fator de atenuação ou crescimento da amplitude da onda (cm^{-1})
α, β	- Fatores de <i>quenching</i> (adim)
$\alpha_e, \beta_e, \gamma_e, \delta_e$	- Constantes moleculares (cm^{-1})
$\alpha, \gamma, \epsilon, \varsigma$	- Razões de produção de espécies excitadas (adim)
β	- Parâmetro de onda complexo definido pela equação (7.19) (cm^{-1})
γ	- Razão entre as capacidades térmicas a pressão e temperatura constantes (adim)
γ_s	- Constante de interação spin-campo magnético, devido à rotação da molécula (cm^{-1})
$\delta, \varepsilon, \theta, \psi$	- Ângulos geométricos (rad)
δ^2	- Parâmetro de onda complexo definido pela equação (7.20) (cm^{-2})
$(\Delta\lambda_{\text{eff}})$	- Largura de transmissão efetiva (nm)

ε	- Taxa volumétrica de emissão (fotóns $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$)
ζ^2, ξ^2	- Parâmetros de onda reais definidos pela equação (7.21) (cm^{-2})
η	- Razão de Krassovsky (adim)
θ	- Expoente genérico definido pela equação (7.47) (adim)
θ_b	- Energia de ativação multiplicada por k_B (reação bimolecular) (K)
θ_t	- Expoente empírico (reação trimolecular) (adim)
κ	- Difusividade térmica eddy ($\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$)
λ	- Comprimento de onda (nm)
$\lambda\lambda$	- Faixa espectral em comprimento de onda
Λ	- Representação genérica de uma grandeza
Λ	- Número quântico que descreve a projeção do momento angular orbital sobre o eixo internuclear de uma molécula
μ	- Índice de refração (adim)
ν	- Viscosidade cinemática eddy ($\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$)
ϖ	- Constante de interação spin-spin dos elétrons (cm^{-1})
ρ	- Densidade numérica do ar atmosférico (molec. cm^{-3})
ρ	- Coeficientes de reflexão (produzidos pelo MEM)
σ	- Energia espectroscópica (cm^{-1})
σ^2	- Variância da série temporal
Σ	- Número quântico que descreve a projeção do momento angular de spin sobre o eixo internuclear de uma molécula
Σ, Π, Δ	- Designação dos estados eletrônicos de uma molécula (autovalores de Λ)
τ	- Defasagem temporal (min)
ϕ	- Ângulo de fase genérico ($^\circ$)
$\vec{\phi}$	- Tensor fluxo de momentum <i>eddy</i> ($\text{cm}^{-1} \text{s}^{-2}$)
φ	- Vetor fluxo térmico <i>eddy</i> (s^{-3})
Φ	- Ângulo de fase entre a taxa de emissão e temperatura rotacional medida ($^\circ$)
Φ_r	- Potência de radiação (W)
χ	- Fator de polarização fotoquímico (adim)
$\psi(R)$	- Função de momento dipolar
ω	- Freqüência angular (aparente) da onda (rad s^{-1})
ω_B	- Freqüência angular de Brunt Väisälä (rad s^{-1})

ω_a	- Frequência angular acústica (rad s^{-1})
$\omega_e, \omega_e x_e, \dots$	- Constantes vibracionais (cm^{-1})
Ω	- Frequência angular de deslocamento Doppler ou frequência angular intrínseca da onda (rad s^{-1})
Ω	- Número quântico da projeção do momento angular total sobre o eixo internuclear de uma molécula

Índices Superiores

'	- Indica a parte perturbada de uma variável
^	- Indica a amplitude sinusoidal complexa (constante) de uma variável perturbada
+, -	- Paridade da função de onda
valor de $(2S + 1)$	- Multiplicidade de spin
$i = 1, 2, 3$	- Identificador da molécula associada aos coeficientes cinéticos de <i>quenching</i> (O, O ₂ , N ₂ , respectivamente)

Índices Inferiores

g, u	- Paridade da função de onda
$\alpha, \beta, \gamma, \nu = 1, 2, \dots$	- Linhas rotacionais
$k = 1, 2, 3, 4$	- Posições do filtro do MULTI2
x, z	- Coordenadas espaciais
$i = 1, 2, 3$	- Identificador da molécula associada às reações de <i>quenching</i> (O, O ₂ , N ₂ , respectivamente)
o	- Indica a parte não perturbada (básica) de uma variável
λ	- Denota a quantidade espectral de uma variável (nm^{-1})

Símbolos Especiais

d	- Operador diferencial genérico
$\frac{D}{Dt}, \frac{\partial}{\partial t}$	- Operadores diferenciais temporais (s^{-1})
$\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial z}, \nabla$	- Operadores diferenciais espaciais (cm^{-1})
Σ	- Somatório
δ, Δ	- Variação
\Re, \Im	- Partes real e imaginária de uma variável complexa
$\mathcal{O}(\epsilon)$	- Erro de ordem ϵ
\forall	- Para todo

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A luminescência atmosférica [do inglês: *airglow*] pode ser definida, grosso modo, como a luz emitida continuamente pela atmosfera de um planeta (Chamberlain, 1961). Caracteriza-se por ser uma radiação de intensidade relativamente tênue, amorfa, de extensa faixa espectral — do ultravioleta distante ($\sim \lambda 250$ nm) ao infravermelho próximo ($\sim \lambda 4 \mu\text{m}$) — e cuja origem resulta de transições discretas envolvendo átomos e moléculas, excitados pela absorção solar ou processos químicos decorrentes, existentes na atmosfera superior. Distingue-se da aurora pelo fato desta confinar-se nas regiões dos pólos magnéticos e apresentar uma ocorrência esporádica; a energia de radiação, diferentemente do *airglow*, origina-se das partículas energéticas provenientes do vento solar.

A história do *airglow* terrestre remonta ao início deste século, quando foi reconhecido por vários astrônomos como sendo uma componente da luz do céu escuro emitida ou espalhada pela atmosfera. Uma série de medidas quantitativas efetuadas por Lord Rayleigh (1930, 1931), em uma restrita faixa espectral, marca o início da pesquisa moderna do *airglow*. Além disso, o trabalho pioneiro de Chapman (1931), na tentativa teórica de explicar a emissão *airglow* da linha verde do oxigênio atômico em $\lambda 557,7$ nm (processo de recombinação direta dos átomos de oxigênio), permanece ainda hoje como um fundamento básico no estudo deste assunto. Posteriormente, com o advento de técnicas experimentais mais refinadas, identificou-se, entre outras, as emissões do oxigênio molecular, O_2 , e as emissões do radical hidroxila (bandas de Meinel), ambas na faixa do infravermelho próximo (Krassovsky *et al.* 1962).

De acordo com o ângulo zenital da radiação solar, a ocorrência da luminescência atmosférica denomina-se de diurna [do inglês: *dayglow*], crepuscular [do inglês: *twilight glow*] ou noturna [do inglês: *nightglow*]. Em geral, as observações ópticas do *airglow* são efetuadas por um dos três métodos a seguir: (1) medidas fotométricas de solo; (2) medidas a bordo de foguete e balão; (3) medidas de satélite. Cada método escolhido tem seu propósito. Caso se deseje investigar as flutuações na intensidade das emissões de *nightglow* (variabilidade temporal), durante o período de uma noite, o método mais indicado — e menos oneroso — é a fotometria de solo.

O registro do perfil vertical da camada de emissão (taxa volumétrica de emissão) do *airglow* é geralmente determinado através das medidas de fotometria a bordo de foguete. Por sua vez, o estudo da distribuição global do campo de radiação do *airglow* pode ser acessível através de técnicas de imageamento instaladas em satélite.

A fonte de energia principal para a produção das emissões de *airglow* é a absorção da radiação solar na faixa espectral do ultravioleta pelo oxigênio molecular da termosfera (reação de fotodissociação do O_2), que produz a espécie química ativa: oxigênio atômico. Processos de transporte, tais como a difusão molecular e turbulenta, atuam de modo a produzir um fluxo descendente destes átomos de oxigênio em direção à região da mesopausa (80 – 100 km) onde, com o aumento da densidade atmosférica, os processos de recombinação química tornam-se efetivos para formar o ozônio, a hidroxila e os estados excitados de átomos e moléculas que, via decaimento radiativo espontâneo, produzem as emissões de *airglow*. Em suma, a intensidade do *airglow* depende da fotoquímica, da densidade e da dinâmica atmosférica. Este acoplamento faz das observações de *airglow* um método muito útil para pesquisar a composição, temperatura e densidade atmosférica e, particularmente, a atividade de ondas de gravidade e maré, ambas decisivas na determinação do fluxo de momentum¹ da média atmosfera (Fritts, 1984).

Já faz algum tempo que as ondas de gravidade têm sido reconhecidas como um elemento essencial na compreensão da dinâmica e estrutura da média atmosfera. Elas devem sua existência às forças de restauração ascencionais — balanço entre as forças devido ao gradiente de pressão e à gravidade — em um fluido estratificado de modo estável (ondas de gravidade internas). Se a frequência resultante destas oscilações é muito alta, os efeitos devido à gravidade são negligenciáveis, e a onda propaga-se como uma onda sonora ordinária (regime acústico). Hines (1960) notou a semelhança que existia entre a estrutura do campo de vento na mesosfera e na termosfera inferior e os efeitos correspondentes aos prognosticados pela passagem destas ondas. Uma explicação física para a predominância das ondas nestas altitudes é a verificação de uma tendência intrínseca de crescimento da amplitude da onda com a altitude, devido à diminuição da densidade atmosférica com a altitude crescente; isto é uma consequência do princípio da conservação de energia. O trabalho pioneiro de Hines (1960) forma a base do presente entendimento dos movimentos ondulatórios na alta atmosfera (Hines, 1989).

¹O termo fluxo de momentum é freqüentemente usado para quantificar a energia depositada pelas ondas de gravidade. É proporcional a $\overline{u'w'}$, onde u' e w' representam as velocidades perturbadas zonal e vertical, respectivamente.

A existência de variações temporais (irregularidades) na taxa de emissão (B) e na temperatura rotacional medida (T_m) do *airglow* de OH^* (o asterisco representa a molécula de hidroxila vibracionalmente excitada) é conhecida há muitos anos (Berthier, 1956). Depois de analisar uma longa série de medidas desta emissão, Krassovsky (1972) sugeriu que as oscilações observadas em B e T_m representavam alternadas compressões e rarefações do ar pela passagem de ondas de gravidade-acústica. Com o objetivo de investigar os processos fotoquímicos relevantes à produção de OH^* , Krassovsky introduziu o parâmetro $\eta = (\delta B / \bar{B}) / (\delta T_m / \bar{T}_m)$, o quociente entre a fração relativa das flutuações na taxa de emissão (δB) pela fração relativa das flutuações na temperatura (δT_m) (a barra colocada sobre as variáveis, indica uma estimativa da média temporal da quantidade). No entanto, suas predições teóricas para η não concordaram inteiramente com as observações, sugerindo que a discrepância poderia ser explicada se um conjunto mais completo de reações químicas fosse adotado. Desde então vários trabalhos têm exibido a presença das ondas de gravidade, no *airglow* de OH^* (Armstrong, 1975; Krassovsky *et al.*, 1977; Moreels e Hersé, 1977; Taylor *et al.*, 1987; Sivjee *et al.*, 1987; Swenson *et al.*, 1990), no *airglow* de $\text{O}_2(b^1\Sigma)$ (Noxon, 1978; Viereck e Decher, 1989; Takahashi *et al.*, 1990; Zhang, 1991) e em várias outras emissões.

O modelo teórico proposto por Walterscheid *et al.* (1987), com base na linearização das equações básicas para uma atmosfera ideal, no sistema de referência Euleriano (elemento de fluido fixo no espaço), combinou química e dinâmica, esta parametrizada pelas ondas de gravidade induzidas no *airglow* de OH^* . Os cálculos predizem o ângulo de fase (ϕ) entre δB e δT_m e a magnitude de η , cujos valores foram mostrados depender da frequência característica (ω), do comprimento das ondas (λ) e das densidades dos constituintes minoritários (n). Hickey (1988a, b) e Schubert *et al.* (1991) modificaram o modelo de Walterscheid *et al.* (1987) incluindo os efeitos difusivos turbulentos (*eddy*) e a força de Coriolis. A capacidade do modelo conseguir explicar as flutuações foi demonstrada nos trabalhos subsequentes de Hecht *et al.* (1987) e Viereck e Deehr (1989).

Hines e Tarasick (1987) desenvolveram uma teoria independente para analisar os efeitos das ondas de gravidade sobre a taxa de emissão e temperatura rotacional do *airglow* de $\text{O}_2(b^1\Sigma)$. Usando uma formulação semi-Lagrangiana (seguindo a parcela de fluido atmosférico), eles mostraram que a não-linearidade que surge devido ao movimento vertical de uma camada de espécies minoritárias,

com acentuado gradiente de densidade local,² não aparece quando as medidas são integradas sobre uma coluna vertical. Os trabalhos posteriores de Tarasick e Shepherd (1992a, b) estenderam o modelo, incorporando uma fotoquímica mais realística para OH^* e $\text{O}_2(b^1\Sigma)$. Mais recentemente, Isler *et al.* (1991) têm reexaminado o assunto, argüindo sobre a importância dos termos não-lineares de ordem superior introduzidos pela própria transformação Lagrangiana. A comparação desta teoria com as medidas tem tido apenas sucesso limitado (Zhang, 1991).

Devido à necessidade de melhorar o conhecimento sobre o *nightglow* das baixas latitudes de algumas emissões do oxigênio atômico, do sódio mesosférico, da hidroxila e do oxigênio molecular, foi desenvolvido no INPE, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, um fotômetro multicanal (referido pela abreviação MULTI2) com cinco filtros de interferência óptica inclináveis. Esse equipamento opera continuamente na cidade de Cachoeira Paulista (22,7° S, 45,0° W) desde 1987, tendo já proporcionado uma longa série de observações e, em especial, medidas referentes à taxa de emissão e à temperatura rotacional da banda (0-1) do sistema $\text{O}_2(b^1\Sigma)$ atmosférico e da banda de Meinel $\text{OH}^*(9-4)$. Estes dados constituem o fundamento deste trabalho.

Esta tese é concernente às atividades que envolvem a aquisição e redução dos dados proporcionados pelo MULTI2, bem como à aplicação de métodos de análise destinados a inferir o conteúdo espectral de $\delta B/B$, $\delta T_m/\bar{T}_m$ e η das emissões de *airglow* do oxigênio e hidroxila em duas altitudes diferentes, 94 km e 88 km respectivamente. É também objetivo deste trabalho o desenvolvimento de uma relação teórica entre *airglow* e ondas de gravidade.

Um algoritmo de estimativa espectral, adaptado especialmente para analisar os dados do MULTI2, será descrito. Este algoritmo, introduzido por Kane (1977), combina o método paramétrico MEM (método da entropia máxima), usado para detectar as possíveis periodicidades contidas em uma determinada série temporal, com o método tradicional de análise de regressão múltipla por funções sinusoidais, a fim de estimar a amplitude e fase características de cada componente do espectro.

Analisando-se as flutuações na taxa de emissão e temperatura rotacional, ambas inferidas dos dados do MULTI2, foi possível detectar vários even-

²Weinstock (1978) conjecturou que uma onda de gravidade que gera uma perturbação de 10% na densidade do ar, pode induzir uma flutuação de 40-100% na densidade dos constituintes minoritários, no mesmo local. Assim, nestes níveis de altitude, o tratamento linear não seria adequado.

tos com ondas quasi-monocromáticas. Os números complexos $\eta_{\text{O}_2(b)}$ e η_{OH^*} serão calculados pelo algoritmo de estimativa espectral utilizado neste trabalho. Estes valores experimentais serão confrontados com um novo modelo de $\eta_{\text{O}_2(b)}$ e η_{OH^*} , que foi desenvolvido seguindo a formulação básica de Walterscheid *et al.* (1987). Esse modelo incorpora a dinâmica das ondas de gravidade linearizadas em uma atmosfera neutra com difusividade de momentum *eddy* e difusividade térmica *eddy*, no sistema de referência Euleriano, e a química linearizada dos constituintes atmosféricos minoritários, que controlam os mecanismos fotoquímicos das emissões de oxigênio e hidroxila.

Logo abaixo, é fornecido um preâmbulo resumido do presente trabalho. Os Capítulos 2 e 3 tratam de tópicos selecionados de espectroscopia e fotoquímica das emissões do oxigênio e hidroxila, respectivamente. O Capítulo 4 descreve em detalhes o experimento MULTI2 e apresenta o método analítico de determinação da temperatura rotacional usado neste trabalho. O Capítulo 5 mostra um conjunto de dados obtidos pelo MULTI2 convertido em taxa de emissão e temperatura rotacional medida. A estimativa do conteúdo espectral das séries temporais $B(t)$ e $T_m(t)$, e a conseqüente obtenção do parâmetro η , é reservada ao Capítulo 6. No Capítulo 7, desenvolve-se o formalismo da interação entre as ondas de gravidade lineares e a camada de *airglow*; o capítulo remata com uma discussão entre teoria e observação. E, finalmente, o Capítulo 8 encerra com as conclusões alcançadas neste estudo.

CAPÍTULO 2

BANDAS ATMOSFÉRICAS O₂

O sistema de bandas atmosféricas de O₂ (dito, o sistema O₂($b^1\Sigma$) atmosférico) origina-se das transições entre os estados eletrônicos $b^1\Sigma_g^+$ (estado excitado) e $X^3\Sigma_g^-$ (estado fundamental) do oxigênio molecular. Este tipo de transição viola a regra de seleção dipolar elétrica $\Sigma^+ \not\leftrightarrow \Sigma^-$. A transição é bem explicada pelas regras de seleção do tipo dipolar magnética, cuja probabilidade associada de realização é muito pequena, comparada com a transição dipolar elétrica.

Em contraste com os valores das vidas-médias — 10^{-6} a 10^{-9} s — da maior parte dos estados excitados que decaem pela radiação de dipolo elétrica, a vida média radiativa das transições proibidas é da ordem de vários segundos ($\simeq 12$ s no caso do sistema O₂($b^1\Sigma$) atmosférico). Em condições normais de pressão atmosférica, estas espécies metaestáveis seriam desativadas por colisões, antes que alguma radiação fosse emitida. Entretanto, na região da mesopausa, onde a pressão do ar é da ordem de 10^{-6} da pressão ao nível do mar, estas espécies são capazes de permanecer excitadas por um tempo suficientemente longo, tal que as emissões proibidas possam ser observadas.

O espectro da transição eletrônica $b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$ consiste de diferentes bandas vibracionais. As bandas vibracionais que se destacam, (0-0) centrada em $\lambda 761,9$ nm e (0-1) $\lambda 864,5$ nm, podem ser facilmente observadas por fotômetro, embora a banda (0-0) sofra uma pronunciada absorção pelo O₂ da média e baixa atmosfera, impossibilitando sua medida por fotometria de solo. A razão de intensidade entre as duas respectivas bandas é da ordem de 17; e o sistema O₂($b^1\Sigma$) atmosférico registra uma taxa de emissão total de 3000-6000 Rayleighs.³

A nomenclatura correta para representar a transição eletrônica-vibracional de O₂, de acordo com a padronização dos termos espectroscópicos de uso corrente, é O₂($v' = 0, b^1\Sigma_g^+ - v'' = 1, X^3\Sigma_g^-$). Porém, neste trabalho, preferiu-se empregar a forma abreviada O₂($b^1\Sigma_g^+, 0-1$) para representar tal transição. Espera-se que seu uso não confunda o leitor.

³Rayleigh (R): unidade utilizada pelos aerônomos para medir a radiância L ($\text{W cm}^{-2} \text{sr}^{-1}$) associada às fontes de intensidade fracas, como por exemplo o *airglow*. Se a radiância for expressa em unidades de Megafótons $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{sr}^{-1}$, então em Rayleighs, a radiância será $4\pi L$.

2.1 - ESPECTROSCOPIA DAS BANDAS DE O₂

A molécula de O₂ é um gás paramagnético (momento magnético permanente no estado fundamental), cuja configuração eletrônica apresenta o último par de elétrons em um orbital ($\pi_g 2p$)², e seus spins paralelos ao invés de opostos. O oxigênio é um emissor de luz relativamente fraco, porque, para a maior parte de seus estados excitados, as transições radiativas ao estado fundamental são severamente proibidas. Entre as várias transições radiativas observadas na espectroscopia do *nightglow*, destaca-se a transição eletrônica $b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$ (intercombinação singleto-triplete do tipo dipolar magnética), considerada aqui neste trabalho.

2.1.1 - Modelo Vetorial para Moléculas Diatômicas

Em uma molécula diatômica (caso de O₂), os elétrons movem-se através de um campo eletrostático que possui simetria axial sobre o eixo internuclear. Conseqüentemente, a projeção do momento angular orbital (L) de todos os elétrons que executam precessão sobre o eixo é aqui conservada, conforme ilustra a Figura 2.1. O valor absoluto da projeção de L é descrito pelo número quântico Λ ; ele assume os valores próprios 0, 1, 2, 3, Os estados eletrônicos da molécula são designados por Σ , Π , Δ , Φ , ..., respectivamente.⁴



Fig. 2.1 - A precessão do momento angular orbital L e spin S sobre o eixo internuclear (considerado aqui, por simplicidade, fixo no espaço) de uma molécula diatômica.

Dois operações de simetria podem ser definidas em uma molécula diatômica: (a) rotação por um ângulo arbitrário sobre o eixo internuclear; (b) reflexão em qualquer plano que passe através dos núcleos. Particularmente, a operação de reflexão (b) muda o sinal do momento angular. Assim, para $\Lambda > 0$, há sempre dois valores de energia possíveis (estados duplamente degenerados), que diferem na

⁴A notação espectroscópica usada aqui segue as recomendações adotadas pela *Triple Commission on Spectroscopy*. Para maiores detalhes consultar: *J. Opt. Soc. Amer.*, 53, 883-885, 1963.

direção da projeção de \mathbf{L} sobre o eixo internuclear. Para o caso $\Lambda = 0$ o estado da molécula não é degenerado. A função de onda de um termo Σ pode somente ser multiplicada por uma constante, devido à operação de reflexão. Visto que uma reflexão dupla num mesmo plano é uma transformação identidade, esta constante é ± 1 . Ao símbolo do estado Σ deve-se seguir um supra-escrito $+$ ou $-$, dependendo da mudança de sinal da respectiva função de onda.

Nas moléculas diatômicas homonucleares uma operação de simetria adicional pode ser definida. É a inversão através do ponto médio do eixo internuclear (quando tomado como a origem de um sistema de coordenadas cartesianas), que constitui-se em um centro de simetria. Dependendo do sinal da função de onda inverter-se ou não, associa-se ao termo eletrônico o subscrito g (*gerade*, par em alemão) ou u (*ungerade*, ímpar em alemão), respectivamente.

Na maioria das moléculas os spins individuais dos elétrons formam uma resultante \mathbf{S} . A multiplicidade $(2S + 1)$ é designada por um supra-escrito que precede ao termo eletrônico (*e.g.*, $^1\Sigma$, $^3\Sigma$...). O movimento orbital dos elétrons nos estados com $\Lambda > 0$ produz um campo magnético dirigido ao longo do eixo internuclear, fazendo \mathbf{S} executar uma precessão sobre este eixo, segundo mostra a Figura 2.1. A projeção de \mathbf{S} sobre o eixo é conservada e o número quântico associado é identificado pelo símbolo Σ . Em particular, para o estado eletrônico Σ (autovalor $\Lambda = 0$), não existe campo magnético resultante devido a \mathbf{L} ; por conseguinte, o número quântico Σ não é mais definido (este estado exhibe somente uma componente, qualquer que seja a multiplicidade de spin).

O valor absoluto da componente do momento angular total é dado por $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$, tal que o número quântico Ω pode tomar valores inteiros ou semi-inteiros. Um subscrito opcional (Ω) pode seguir ao símbolo do termo.

2.1.2 - Transições Eletrônicas no O_2

Dois modos adicionais de movimento, que não ocorrem nos átomos, são possíveis em uma molécula: a vibração e a rotação dos núcleos relativos ao eixo internuclear. A quantização destes modos, representados classicamente pelo oscilador harmônico e rotor rígido, respectivamente, revela a estrutura complexa do espectro de bandas vibracionais-rotacionais de uma molécula.

A um dado estado eletrônico correspondem muitos estados vibracionais e a cada estado vibracional correspondem vários estados rotacionais. Em primeira aproximação, a energia total de uma molécula é dada pelo somatório das

energias eletrônica, vibracional e rotacional da molécula. O número quântico representativo dos níveis vibracionais é denotado por v . Por exemplo, a transição (0–1) é equivalente a dizer: a transição entre os níveis vibracionais de $v' = 0$ para $v'' = 1$ (v' e v'' associam-se aos estados superior e inferior, respectivamente). De acordo com as convenções espectroscópicas a banda de origem (em cm^{-1}) é definida por:

$$\sigma_0(v', v'') = \sigma_e + G(v') - G(v''), \quad (2.1)$$

onde σ_e representa a separação entre os dois valores mínimos das curvas de energia potencial (equivalente à diferença de energia eletrônica entre os respectivos estados) e G é o termo de energia vibracional,

$$G(v) = \omega_e \left(v + \frac{1}{2}\right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + \omega_e y_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^3 + \omega_e z_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^4, \quad (2.2)$$

calculado pelo modelo de oscilador anarmônico. As constantes vibracionais $\omega_e x_e$, ..., para os dois estados eletrônicos, $^1\Sigma$ e $^3\Sigma$ do O_2 , encontram-se relacionadas na Tabela 2.1.

Incluindo a energia rotacional (F), define-se a energia total envolvida na transição entre dois estados eletrônicos:

$$\sigma = \sigma_0(v', v'') + F(J') - F(J''). \quad (2.3)$$

Neste caso J é o número quântico que determina o momento angular total da molécula (incluindo spin).

A Figura 2.2 mostra as curvas de energia potencial, em função da separação internuclear, para os principais termos eletrônicos da molécula de O_2 . O estado fundamental (nível mínimo de energia) corresponde ao tripleto $^3\Sigma_g^-$. As energias limites de dissociação dos respectivos estados também são consideradas. As letras latinas que precedem aos termos eletrônicos são usualmente empregadas para abreviar os respectivos estados. A Figura 2.2 também identifica as principais transições ópticas entre os estados estáveis. Em particular, o sistema $\text{O}_2(b^1\Sigma)$ atmosférico resulta da transição eletrônica entre os estados $b-X$.

Ao considerar-se um modelo molecular mais realístico, deve-se ponderar que os movimentos eletrônicos e dos núcleos acontecem simultaneamente. No sentido clássico, a rotação da molécula no espaço livre introduz forças giroscópicas que perturbam o movimento orbital dos elétrons, e os núcleos originam um campo magnético que, por sua vez, interage com o campo devido ao spin eletrônico. Como uma consequência destes acoplamentos, a energia total da molécula não pode mais ser separada como uma soma exata de três componentes (equação 2.2), mas devem ser incluídos termos adicionais de segunda ordem que representem estas interações.

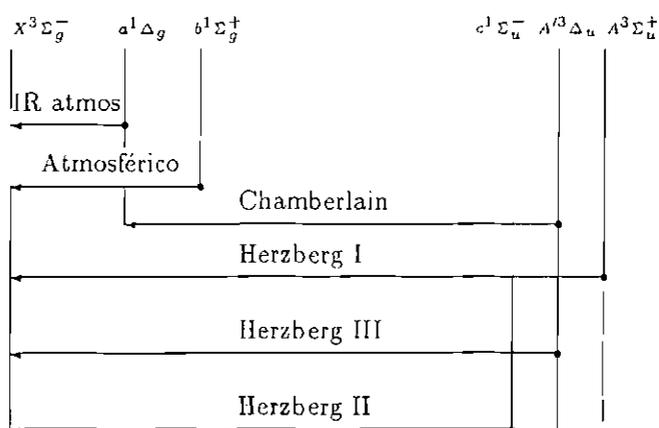
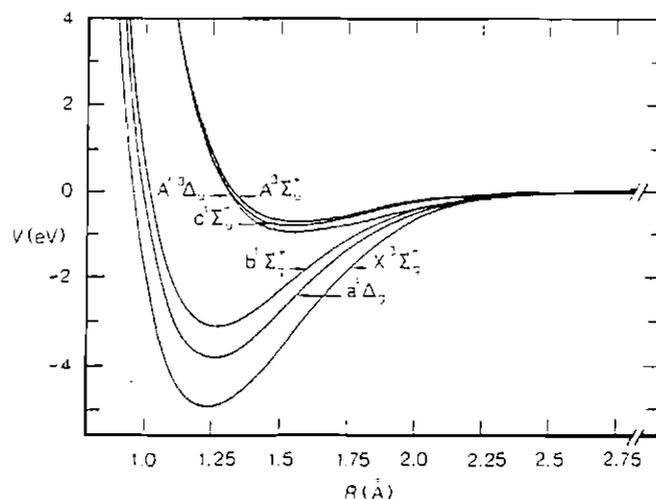


Fig. 2.2 - Diagrama parcial das curvas de energia potencial de O_2 e a nomenclatura das transições eletrônicas entre os vários estados. Todas estas transições são proibidas pelas regras de seleção do tipo dipolar elétrica.

FONTE: Rees (1984), p. 155.

Pelo menos dois tipos importantes de acoplamento entre os diferentes momentos angulares na molécula foram distinguidos pela teoria de Hund. Estes casos, designados por (a) e (b), representam situações limites, nas quais diferentes tipos de interação predominam. Na prática a maior parte dos estados moleculares mostram um tipo de comportamento intermediário entre estes casos. No caso (a)

de Hund, o vetor \mathbf{S} e o vetor \mathbf{L} estão vigorosamente acoplados ao eixo internuclear (vide Figura 2.3, caso *a*). A interação da rotação nuclear com o movimento eletrônico (tanto o spin quanto o orbital) é muito fraca. O resultado deste acoplamento deixa $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$ bem definido. O momento angular da rotação nuclear \mathbf{N} e Ω formam a resultante \mathbf{J} . O número quântico J assume os seguintes valores possíveis: $\Omega, \Omega + 1, \dots$. A energia rotacional no caso (*a*) de Hund é dada por:

$$F_v(J) = B_v J(J + 1) - D_v J^2(J + 1)^2 + H_v J^3(J + 1)^3, \quad (2.4)$$

e as constantes

$$B_v = B_e - \alpha_e(v + \frac{1}{2}) + \gamma_e(v + \frac{1}{2})^2 + \delta_e(v + \frac{1}{2})^3, \quad (2.5)$$

$$D_v = D_e + \beta_e(v + \frac{1}{2}), \quad (2.6)$$

$$H_v \sim H_e, \quad (2.7)$$

são definidas, para o v -ésimo estado vibracional, em termos de constantes rotacionais ($B_e, D_e, H_e, \alpha_e, \beta_e, \gamma_e$ e δ_e) na distância internuclear de equilíbrio (corresponde ao valor mínimo do poço de potencial), que dependem da forma da curva de energia.

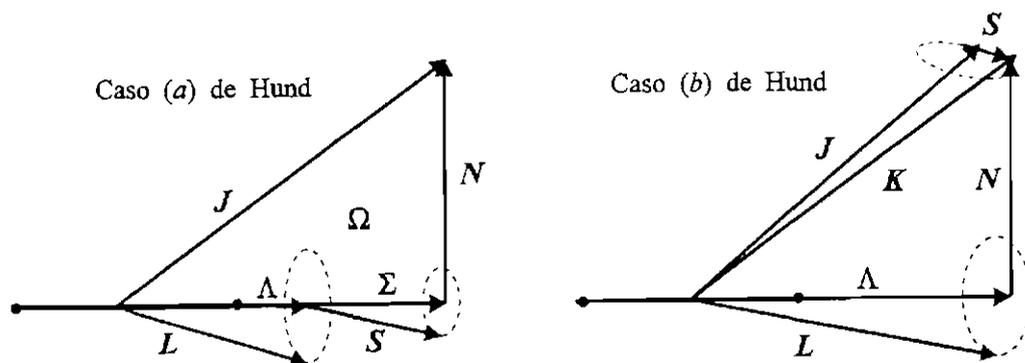


Fig. 2.3 - Diagramas vetoriais para os dois casos limites do acoplamento $\mathbf{S} - \mathbf{L}$, conforme a teoria de Hund.

FONTE: Herzberg (1950), p. 219.

Quando as rotações moleculares tornam-se muito rápidas, o spin desacopla-se de \mathbf{L} e torna-se acoplado ao campo gerado pela rotação molecular. A molécula, então, está no domínio do caso (*b*) de Hund (vide Figura 2.3, caso *b*). O vetor \mathbf{S} não se encontra mais acoplado ao eixo internuclear, deixando Ω não mais definido. O momento angular Λ e \mathbf{N} formam uma resultante que é representada por \mathbf{K} (excluindo spin), tal que o número quântico K assume os seguintes valores: $K = \Lambda, \Lambda + 1, \dots$. Neste caso, a energia rotacional dos níveis é determinada

principalmente por K , e o spin origina uma pequena separação em sub-níveis de energia. Em particular, para o tripleto ${}^3\Sigma$, deve-se calcular três termos rotacionais, F_1 , F_2 , e F_3 . A teoria desenvolvida por Schlapp (1937) fornece estas expressões:

$$F_1 = W_0 - (2K + 3)B_v - \varpi - \sqrt{(2K + 3)^2 B_v^2 + \varpi^2 - 2\varpi B_v} + \gamma_s(K + 1), \quad (2.8)$$

$$F_2 = W_0, \quad (2.9)$$

$$F_3 = W_0 - (2K - 1)B_v - \varpi + \sqrt{(2K - 1)^2 B_v^2 + \varpi^2 - 2\varpi B_v} - \gamma_s K, \quad (2.10)$$

onde,

$$W_0 = B_v K(K + 1) - D_v K^2(K + 1)^2 + H_v K^3(K + 1)^3. \quad (2.11)$$

Os valores das constantes de separação ϖ e γ , para o estado fundamental ${}^3\Sigma_g^-$ de O_2 , são dadas na Tabela 2.1.

A estrutura vibracional-rotacional do sistema $O_2(b^1\Sigma)$ atmosférico da molécula de oxigênio, $b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$, é detalhada na Figura 2.4. Os níveis rotacionais associados ao nível vibracional (0-1) são mostrados em uma escala de energia expandida. De acordo com as regras de seleção do tipo dipolar magnética (Herzberg, 1950, pp. 275-279) é possível definir quatro ramos rotacionais, sendo dois ramos principais ${}^P P$ e ${}^R R$ e dois ramos satélites ${}^P Q$ e ${}^R Q$. Estes ramos podem ser enunciados por:

$$\begin{aligned} {}^P P(K') &= F(J', K', v') - F_2(J' + 1, K' + 1, v''), & K' = J' = 0, 2, \dots; \\ {}^R R(K') &= F(J', K', v') - F_2(J' - 1, K' - 1, v''), & K' = J' = 2, 4, \dots; \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} {}^P Q(K') &= F(J', K', v') - F_3(J', K' + 1, v''), & K' = J' = 2, 4, \dots; \\ {}^R Q(K') &= F(J', K', v') - F_1(J', K' - 1, v'') & K' = J' = 2, 4, \dots; \end{aligned}$$

A Tabela 2.2 fornece o espectro da banda (0-1), corrigido pelo índice de refração do ar, que é calculado, segundo a equação (2.3), por um programa denominado `spect02.bas`, e listado no Apêndice A. O espectro obtido neste trabalho encontra-se em acordo com os valores tabulados na literatura científica (veja, por exemplo, o atlas do espectro de *airglow* elaborado por Krassovsky, 1962).

DIAGRAMA ELETRÔNICO -
VIBRACIONAL

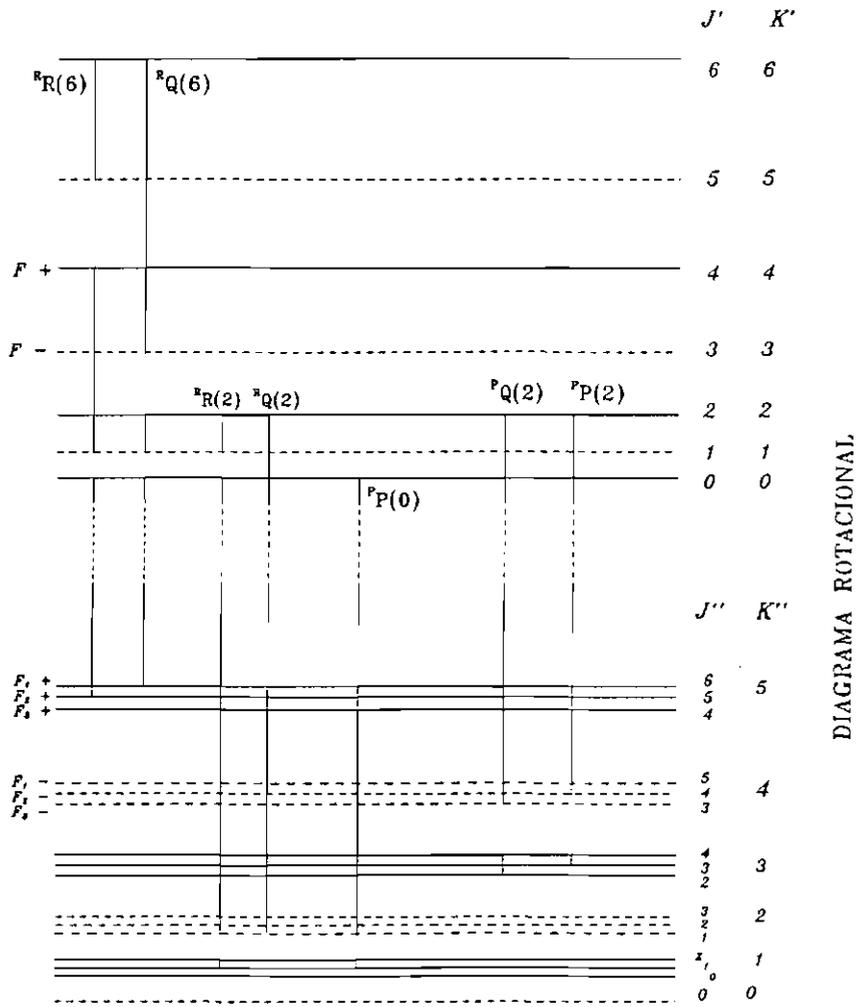
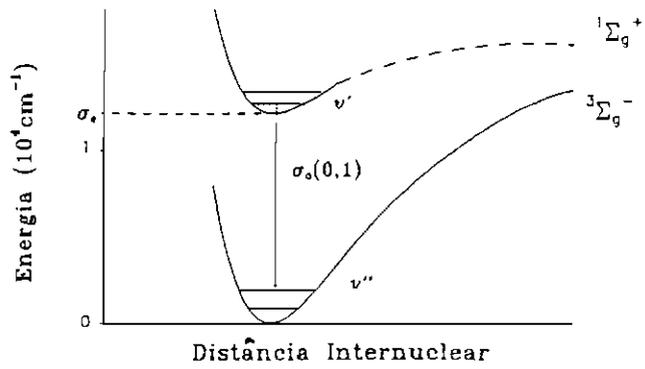


Fig. 2.4 - Diagrama vibracional-rotacional entre os estados eletrônicos ${}^1\Sigma_g^+ - {}^3\Sigma_g^-$ de O_2 .

TABELA 2.1 - CONSTANTES MOLECULARES PARA A TRANSIÇÃO
 $(^1\Sigma_g^+ - ^3\Sigma_g^-)^\dagger$

Ctes. vibracionais:	Estado $^1\Sigma$	Estado $^3\Sigma$
ω_e	1432,6661	1580,1932
$\omega_e x_e$	13,9336	11,980804
$\omega_e y_e$	-0,0143	0,047474736
$\omega_e z_e$	0	-0,0012727481
Ctes. rotacionais:		
B_e	1,4004796	1,445622
α_e	0,018169303	0,01593268
γ_e	$-4,294192 \times 10^5$	$6,406456 \times 10^5$
D_e	$5,356 \times 10^6$	$4,957 \times 10^6$
β_e	$7,7 \times 10^8$	$8,8 \times 10^8$
δ_e	0	$-2,846158 \times 10^6$
H_e	0	0
Constantes. Interação spin-campo magnético:		
	γ_s	0,00837
	$\varpi(v=0)$	1,984
	$\varpi(v)$	1,993

† Todos os valores estão em unidades de cm^{-1} .

FONTE: Krupenie (1972), p. 456.

TABELA 2.2 - O ESPECTRO- λ (nm) DE $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ CORRIGIDO AO AR

K	ramo $^P P$	ramo $^P Q$	ramo $^R Q$	ramo $^R R$
0	864,686			
2	865,125	864,969	863,921	864,062
4	865,583	865,432	863,523	863,670
6	866,060	865,911	863,147	863,296
8	866,555	866,408	862,790	862,940
10	867,068	866,923	862,452	862,604
12	867,601	867,457	862,133	862,287
14	868,152	868,010	861,833	861,988
16	868,722	868,581	861,552	861,709
18	869,310	869,171	861,290	861,448
20	869,918	869,780	861,048	861,207
22	870,545	870,407	860,825	860,986
24	871,191	871,054	860,622	860,784
26	871,856	871,721	860,438	860,601
28	872,540	872,406	860,274	860,438
30	873,244	873,111	860,130	860,296

2.2 - TEMPERATURA ROTACIONAL DA BANDA ATMOSFÉRICA $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$

Considerando uma distribuição de Boltzmann nos níveis rotacionais, a intensidade espectroscópica de uma linha rotacional individual (transição $J' \rightarrow J''$), em fótons $s^{-1} \text{ cm}^{-3}$, pode ser obtida pela seguinte expressão:

$$I(J', v', {}^1\Sigma \rightarrow J'', v'', {}^3\Sigma) = \frac{C_{v'}}{Q_r} S(J', J'') e^{-\frac{hc}{k_B T} F(J', v', {}^1\Sigma)} \quad (2.13)$$

(Herzberg, 1950), onde

- F é o termo (de energia) rotacional (cm^{-1});
- $C_{v'}$ é a concentração total de moléculas em $v' = 0$;
- Q_r é a função partição rotacional:

$$Q_r = \sum_J S(J', J'') e^{-\frac{hc}{k_B T} F(J', v', {}^1\Sigma)};$$

- $S(J', J'')$ está relacionado aos fatores de Hönl-London (funções dependentes do tipo de acoplamento entre spin, momento orbital e momento angular nuclear - teoria de Hund). No caso particular, os valores abaixo são devidos a Schlapp (1932):

$$\begin{aligned} S({}^P P) &= \frac{1}{2}(J' + 2), \\ S({}^P Q) &= \frac{1}{2}(J' + 3/4), \\ S({}^R Q) &= \frac{1}{2}(J' + 1/4), \\ S({}^R R) &= \frac{1}{2}(J' - 1); \end{aligned}$$

- σ é a energia total da linha (cm^{-1});
- T é a temperatura rotacional em Kelvin (K);
- $hc/k_B = 1,4338786\dots$ (cm K^{-1}), onde h é a constante de Planck, c é a velocidade da luz e k_B é a constante de Boltzmann.

A Figura 2.5 mostra o espectro da distribuição das intensidades, calculado pelo programa `spect02.bas` em duas temperaturas rotacionais extremas: 150 K e 250 K. A intensidade mostrada é convenientemente normalizada, e definida por:

$$i_l = \frac{I_l}{\sum_l I_l}, \quad \forall l = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{linhas rotacionais}). \quad (2.14)$$

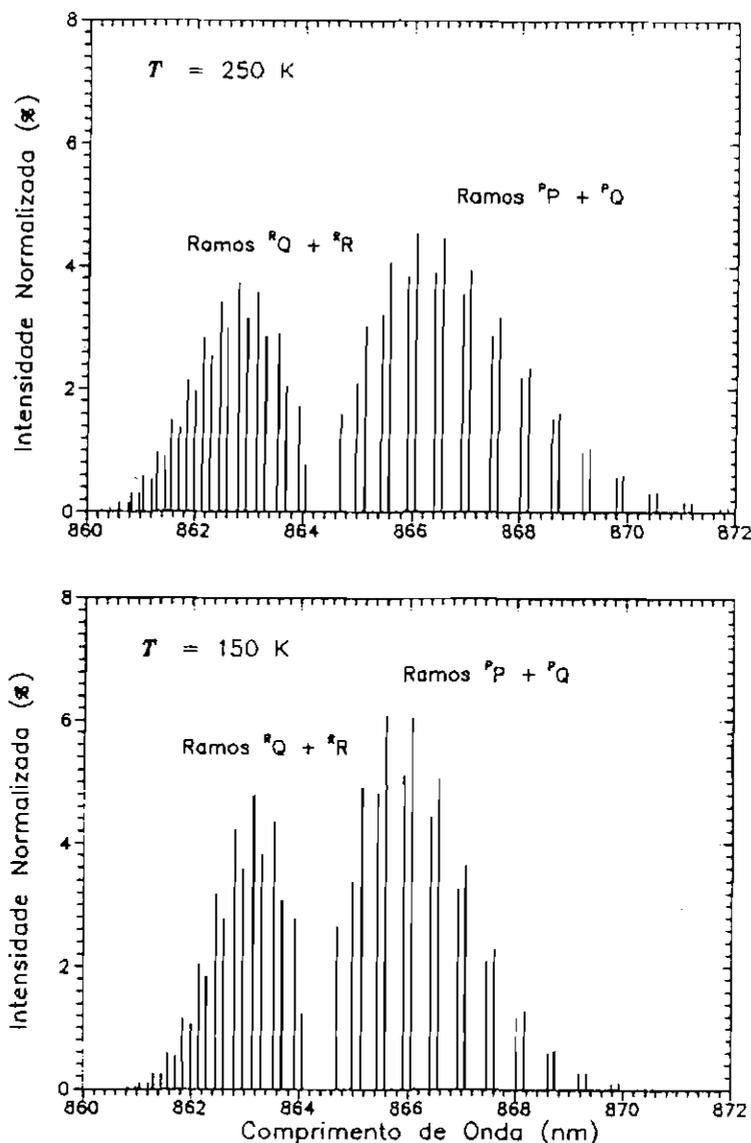


Fig. 2.5 - Espectro teórico da banda (0-1) do sistema O_2 atmosférico para $T = 150$ K (abaixo) e $T = 250$ K (acima), calculado pelo programa spect02.bas.

Em princípio, a temperatura rotacional, T , pode ser calculada se $\ln(I/\sigma^3 S)$ é colocado em função de F , para uma dada linha ou um grupo de linhas rotacionais, substituindo-se os valores medidos de I . A declividade da curva fornecerá o valor de T . O método utilizado pelo MULTI2 para medir a temperatura rotacional de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ será introduzido no Capítulo 4.

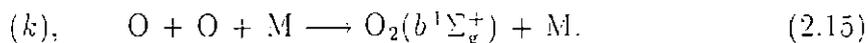
Desde que a relaxação rotacional seja suficientemente rápida, a distribuição das linhas rotacionais (ou a temperatura rotacional associada a elas) pode

representar a temperatura cinética média da mesopausa (Chamberlain, 1961). Esta constatação aplica-se a $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, devido essencialmente à vida média de desativação longa (por emissão radiativa espontânea) que esta espécie metaestável apresenta, quando comparada com o intervalo de tempo entre sucessivas colisões com as moléculas da atmosfera ambiente.

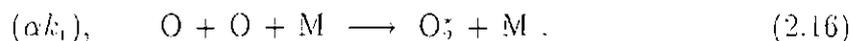
Várias medidas da temperatura rotacional da banda (0-1) têm sido reportadas. Por exemplo, os dados de Noxon (1978) fornecem valores que variam de 110 K a 210 K em maio de 1974; as observações de Yee *et al.* (1991) revelam valores de 170 K a 210 K; entre outras. As medidas reportadas variam espacial e temporalmente, o que sugere um elevado grau de dispersão dos valores.

2.3 - FOTOQUÍMICA DO SISTEMA O_2 ATMOSFÉRICO

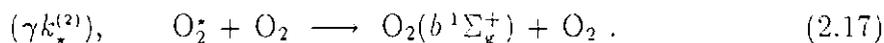
O trabalho pioneiro de Meinel (1950), na identificação do sistema O_2 atmosférico no espectro do *nightglow* terrestre, propunha o mecanismo da recombinação direta de três corpos (mecanismo de Chapman) responsável pela emissão:



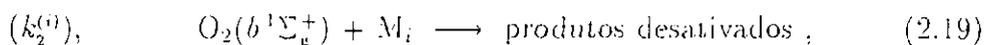
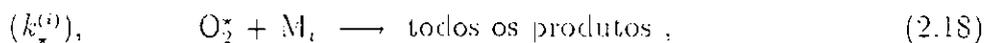
Posteriormente, os trabalhos de Witt *et al.* (1979), Greer *et al.* (1981) e McDade *et al.* (1986), relativos à banda atmosférica (0-0) demonstram, claramente, que os processos de transferência de energia (mecanismo de Barth, 1964) são mais eficientes para a produção destas espécies:



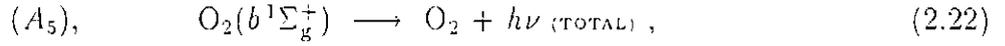
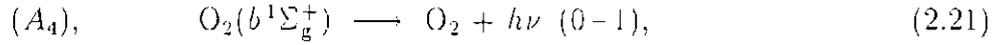
seguida da reação de *quenching*⁵ para a molécula precursora excitada O_2^* , que transfere energia suficiente para excitar $O_2(b^1\Sigma_g^+)$,



As outras reações que complementam o processo são:



⁵Desativação colisional [do inglês: *quenching*]: é um processo de transferência de energia intermolecular que degrada o estado eletrônico, vibracional e/ou rotacional de uma molécula.



onde $M_i = \{O, O_2, N_2\}_{i=1,2,3}$, e M representa uma molécula média do ar mesosférico. Os detalhes da notação empregada aqui nesta seção, sobretudo para os coeficientes cinéticos das reações, serão oportunamente esclarecidos.

Assumindo a condição de equilíbrio fotoquímico, e representando por n a densidade de um dado constituinte, a taxa volumétrica de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, em fótons $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$, pode ser expressa por:

$$\mathcal{E}_{O_2(b^1\Sigma_g^+)} = \frac{A_4 \alpha k_1 n(O)^2 n(M) \gamma k_2^{(2)} n(O_2)}{(A_5 + \sum_i k_2^{(1)} n(M_i)) (A_4 + \sum_i k_2^{(1)} n(M_i))}. \quad (2.23)$$

A identificação do estado eletrônico do agente precursor na excitação de $O_2(b^1\Sigma_g^+)$, através do mecanismo de transferência de energia é ainda uma questão sem uma conclusão definitiva. Os trabalhos recentes de Bates (1988a, b) indicam os estados $c^1\Sigma_u^-$ e $^5\Pi_g$ como os prováveis candidatos.

A Figura 2.6 mostra alguns dos perfis (em fótons $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$) observados da emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-0)$. Embora as taxas volumétricas de emissão medidas (por fotometria a bordo de foguete) sejam referentes ao perfil vertical da banda (0-0), os mesmos aspectos são encontrados no perfil vertical da banda (0-1), conforme Harris *et al.* (1983), exceto que a razão de intensidade entre as duas respectivas bandas é da ordem de 17. Constata-se que apesar dos dados terem vindo de diferentes experimentos de foguete, e terem sido executados em diferentes datas e localizações geográficas, a espessura da camada manteve-se relativamente constante entre os perfis (entre 8 a 10 km). O pico da emissão situa-se em torno de 94 ± 1 km. A taxa de emissão total (em unidades R), no entanto, exhibe variações com razão até maior do que 10 entre os experimentos. Estas elevadas variações exibidas na camada de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-0)$ não podem ser explicadas através dos efeitos provocados pela passagem de ondas de gravidade e marés; elas são creditadas ao próprio mecanismo de excitação, cuja intensidade é proporcional a $n(O)^2$ — a distribuição de densidade de oxigênio atômico, inferida de vários experimentos, tem mostrado uma acentuada variabilidade, de um fator de aproximadamente 3 (Gobbi *et al.* 1992).

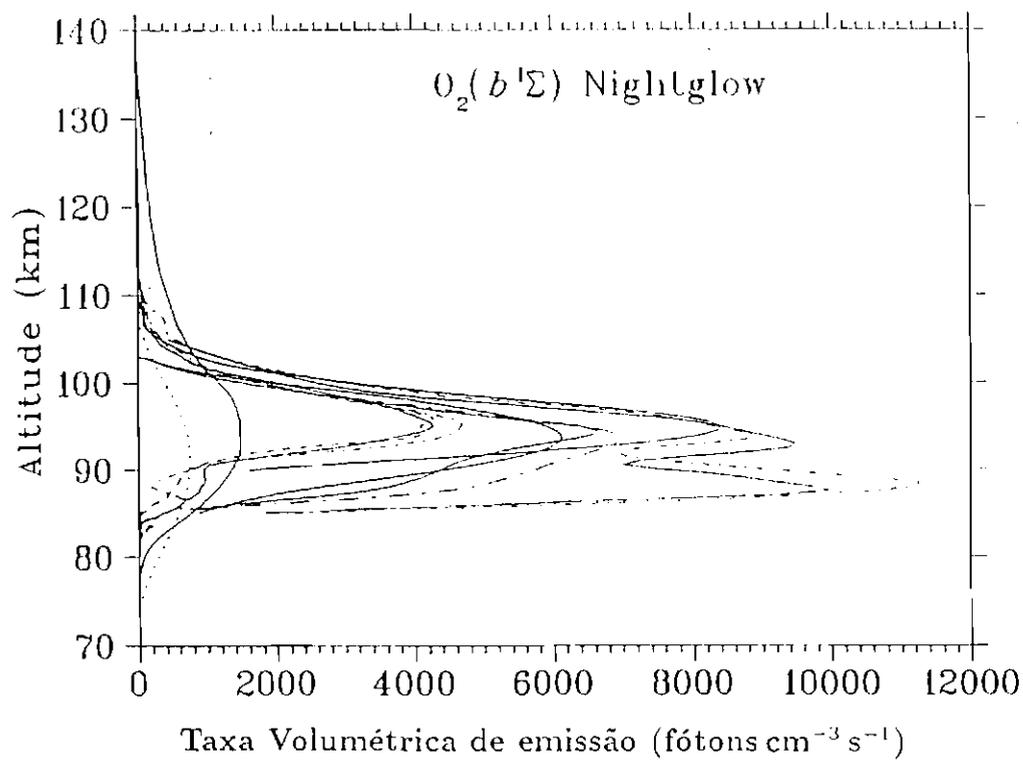


Fig. 2.6 - Perfis observados da banda atmosférica (0-0), provenientes de diferentes experimentos de foguetes e efetuados em diferentes localizações geográficas.

FONTE: Tarasick e Evans (1990)

CAPÍTULO 3

BANDAS DE MEINEL $\text{OH}^*(v \leq 9)$

Estas bandas [ditas, bandas de Meinel] surgem das transições radiativas entre os nove níveis vibracionais (v) mais baixos do estado eletrônico fundamental $X^2\Pi$ do radical OH. Um oscilador harmônico quântico tem transições permitidas somente para $\Delta v = 1$; a existência de seqüências vibracionais com $\Delta v > 1$ é devida aos poços de potencial anarmônicos da molécula OH.

Elas têm sido observadas no *nightglow*, desde sua identificação espectroscópica por Meinel (1950), com propósitos diversos, entre os quais destacam-se: a compreensão das cadeias catalíticas na química do ozônio (O_3) mesosférico; o cálculo da temperatura rotacional; e a investigação da dinâmica mesosférica. O espectro do *nightglow* das bandas de Meinel estende-se de $\lambda 520 \text{ nm} - 4 \mu\text{m}$, e registra uma taxa de emissão total de $\sim 4,5 \text{ MR}$ (megaRayleigh). As bandas mais intensas ($\Delta v = 2$) aparecem no infravermelho próximo entre $\lambda 1,43 \mu\text{m}$ (banda 2-0) e $\lambda 2,15 \mu\text{m}$ (banda 9-7), apresentando taxas de emissão da ordem de 100 kR. Em particular, a banda (9-4), observada pelo MULTI2, no presente trabalho, exhibe valores de 300 - 1000 R.

3.1 - ESPECTROSCOPIA DAS BANDAS DE MEINEL

O radical OH é uma molécula diatômica paramagnética, cuja configuração eletrônica do último par de elétrons encontra-se no orbital $(\pi_g 2p)^3$. Dependendo da natureza da transição envolvida, pode-se distinguir duas categorias espectrais: eletrônica e vibracional-rotacional. O espectro eletrônico de OH contém, pelo menos, quatro transições radiativas observadas e identificadas, principalmente no espectro solar. Um diagrama resumido das transições eletrônicas é mostrado na Figura 3.1. O espectro vibracional-rotacional de OH é caracterizado pelas transições radiativas entre os diversos níveis vibracionais do estado eletrônico fundamental $^2\Pi$. O *nightglow* destaca-se como uma das mais eficientes fontes de emissão vibracional-rotacional do radical OH. Estas bandas são o objeto de estudo neste trabalho.

Considerando as transições *intramultipletos*, as energias rotacionais são determinadas pelas fórmulas de Hill e Van Vleck (1928):

$${}^2\Pi_{\frac{3}{2}} : K = J - \frac{1}{2}, \quad F_1(K, v) = B_v[(K+1)^2 - 1 - \frac{1}{2}\sqrt{4(K+1)^2 + Y_v(Y_v - 4)}] - D_v K^2(K+1)^2, \quad (3.1)$$

$${}^2\Pi_{\frac{1}{2}} : K = J + \frac{1}{2}, \quad F_1(K, v) = B_v[K^2 - 1 + \frac{1}{2}\sqrt{4K^2 + Y_v(Y_v - 4)}] - D_v K^2(K+1)^2, \quad (3.2)$$

onde B_v e D_v são definidos pelas Equações (2.5) e (2.6) e $Y_v = A_v/B_v$, sendo A_v a constante de acoplamento spin-momento angular. Estas constantes, bem como as constantes vibracionais necessárias para calcular as energias vibracionais (equação 2.2) das bandas de Meinel, estão relacionadas na Tabela 3.1.

Em relação às transições *intramultipletos*, pode-se definir seis ramos rotacionais, conforme mostra a Figura 3.2:

$$\begin{aligned} \text{Grupo (1):} \quad & J = K + 1/2 \\ & P_1(K') = F_1(J', K', v') - F_1(J' + 1, K' + 1, v'') \quad K' = 1, 2, \dots; J' = 3/2, 5/2, \dots, \\ & Q_1(K') = F_1(J', K', v') - F_1(J', K', v'') \quad K' = 1, 2, \dots; J' = 3/2, 5/2, \dots, \\ & R_1(K') = F_1(J', K', v') - F_1(J' - 1, K' - 1, v'') \quad K' = 2, 3, \dots; J' = 5/2, 7/2, \dots, \\ \text{Grupo (2):} \quad & J = K - 1/2 \\ & P_2(K') = F_2(J', K', v') - F_2(J' + 1, K' + 1, v'') \quad K' = 1, 2, \dots; J' = 1/2, 3/2, \dots, \\ & Q_2(K') = F_2(J', K', v') - F_2(J', K', v'') \quad K' = 1, 2, \dots; J' = 1/2, 3/2, \dots, \\ & R_2(K') = F_2(J', K', v') - F_2(J' - 1, K' - 1, v'') \quad K' = 2, 3, \dots; J' = 3/2, 5/2, \dots \end{aligned} \quad (3.3)$$

TABELA 3.1 - OS TERMOS VIBRACIONAIS E AS CONSTANTES DA MOLÉCULA OH

v	G_v (cm ⁻¹)	B_v (cm ⁻¹)	$D_v \times 10^{-3}$ (cm ⁻¹)	A_v (cm ⁻¹)
0	1847,726	18,5504	1,9083	-139,054
1	5417,369	17,8386	1,8695	-139,325
2	8821,410	17,1363	1,8345	-139,593
3	12061,771	16,4409	1,8045	-139,850
4	15139,548	15,7491	1,7809	-140,088
5	18054,848	15,0567	1,7650	-140,299
6	20806,549	14,3588	1,7654	-140,439
7	23392,029	13,6492	1,7838	-140,491
8	25806,719	12,9169	1,7984	-140,399
9	28043,783	12,1517	1,8599	-140,176

FORTE: Coxon e Foster (1982), pp. 45-46.

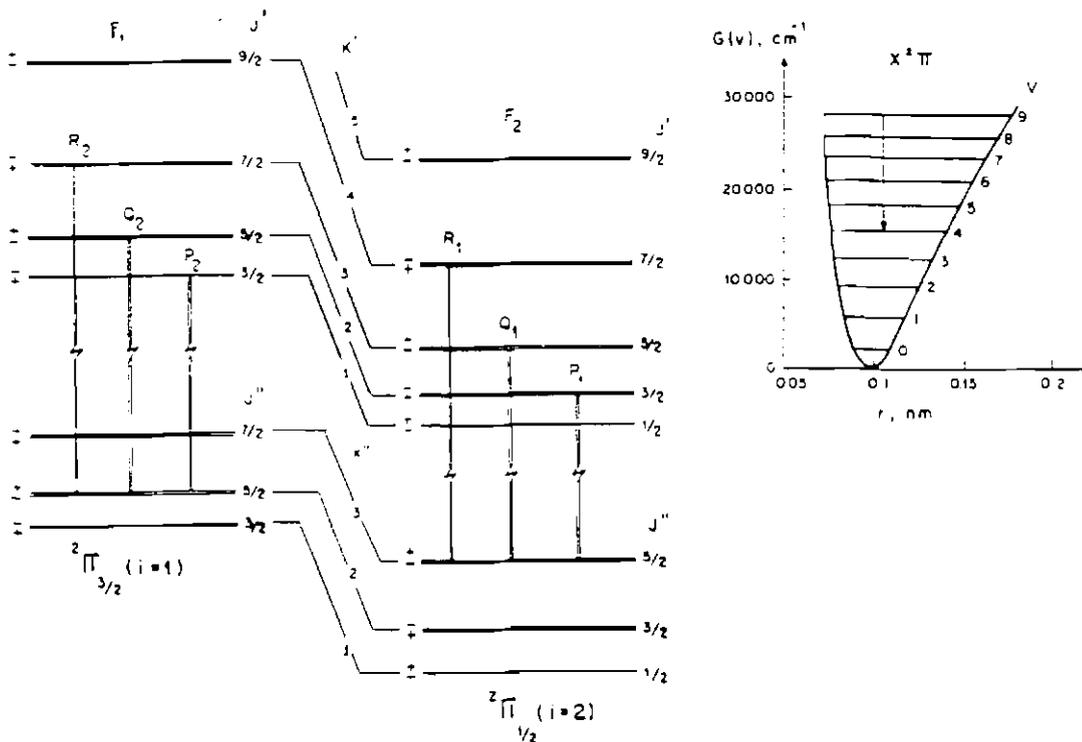


Fig. 3.2 - Os níveis vibracionais e rotacionais de $\text{OH}(X^2\Pi_i)$. A estrutura dos ramos rotacionais devido ao desdobramento tipo-A não foi aqui considerada, desde que no *nightglow* ela ainda não tem sido observada.

A Tabela 3.2 mostra o espectro da banda de Meinel (9-4), corrigido pelo índice de refração do ar, que é calculado por um programa denominado *spectOH.bas* e listado no Apêndice A. Estes valores estão em acordo, por exemplo, com o espectro publicado por Mohan e Shardanand (1975).

TABELA 3.2 - O ESPECTRO- λ (nm) DA BANDA DE MEINEL (9-4)
CORRIGIDO AO AR

J'	ramo P ₂	ramo Q ₂	ramo R ₂	ramo P ₁	ramo Q ₁	ramo R ₁
0,5	778,043	774,942				
1,5	780,847	775,686	772,603	779,421	775,068	
2,5	784,129	776,915	771,805	782,165	776,006	771,690
3,5	787,884	778,620	771,507	785,356	777,346	771,262
4,5	792,115	780,795	771,696	789,011	779,106	771,222
5,5	796,829	783,439	772,364	793,143	781,301	771,588
6,5	802,040	786,555	773,505	797,768	783,944	772,373
7,5	807,765	790,153	775,119	802,901	787,050	773,592
8,5	814,022	794,244	777,210	808,557	790,631	775,257
9,5	820,832	798,842	779,786	814,754	794,704	777,381
10,5	828,222	803,965	782,857	821,514	799,283	779,978
11,5	836,218	809,633	786,438	828,860	804,389	783,063
12,5	844,850	815,870	790,545	836,819	810,041	786,652
13,5	854,154	822,702	795,197	845,420	816,262	790,763
14,5	864,166	830,157	800,417	854,696	823,080	795,418

3.2 - TEMPERATURA ROTACIONAL DA BANDA OH (9-4)

As temperaturas rotacionais de OH*(X²Π) são determinadas através da distribuição de intensidade das linhas rotacionais. Considerando uma distribuição de Boltzmann dos níveis rotacionais multipletos, a intensidade em fótons s⁻¹ cm⁻³ é dada pela seguinte expressão :

$$I(J', v', i' \rightarrow J'', v'', i') = C_{v'} A_{v'', J'', i''}^{v', J', i'} \frac{2(2J' + 1)}{Q_{v'}} e^{-\frac{h c}{k_B T} F_{v'}(J', v')} \quad (3.4)$$

(Mies, 1974) onde,

- $Q_{v'}$ é a função de partição:

$$Q_{v'}(T) = \sum_{J', i'} 2(2J' + 1) e^{-\frac{h c}{k_B T} F_{v'}(J', v')}$$

- $A_{v'', J'', i''}^{v', J', i'}$ é a probabilidade de transição de Einstein (em s^{-1}) para uma transição radiativa do estado $|J', K', v', i'\rangle$ ao estado $|J'', K'', v'', i''\rangle$:

$$A_{v'', J'', i''}^{v', J', i'} = \frac{64\pi^4}{3h} \sigma_{v', v''}^3 |\langle v'', J'' | \psi(R) | v', J' \rangle|^2 S_{v', J' \rightarrow v'', J''};$$

- $f_{v', J' \rightarrow v'', J''}$ é o fator f de Herman-Wallis, que representa a correção aos efeitos de acoplamento vibracional-rotacional;
- $\psi(R)$ é a função de momento dipolo elétrica teórica, dependente da distância internuclear R ;
- e os outros símbolos usados aqui encontram-se definidos na Seção 2.2.

Os valores dos coeficientes de Einstein usados para obtenção do espectro das intensidades são devidos a Turnbull e Lowe (1989). A Figura 3.3 exhibe o espectro da distribuição das intensidades normalizadas, $i = i(\lambda)$, calculado pelo programa `spectOH.bas` em duas temperaturas rotacionais extremas: 150 e 250 K.

A equação (3.4) pode ser invertida,

$$\ln\{I/[2(2J'+1)A_{v'', J'', i''}^{v', J', i'}]\} = \ln\left(\frac{C_{v'}}{Q_{v'}}\right) - \frac{F_{v'}(J')hc}{k_B T}, \quad (3.5)$$

e a temperatura rotacional T pode ser deduzida da declividade, locando-se o lado esquerdo da equação (3.5) versus $F_{v'}(J')$. A curva obtida desta forma é uma linha reta, e qualquer par de linhas rotacionais pode ser empregado para determinar T . O método utilizado pelo MULT2 para medir a temperatura rotacional de $\text{OH}^*(9-4)$ será considerado no Capítulo 4.

A teoria cinética dos gases pode ser aplicada para avaliar a frequência média de colisão (\bar{f}) da molécula de OH na mesopausa — suposta constituída predominantemente de N_2 . Um cálculo simplificado, que despreza a energia dos movimentos internos (tais como rotação e vibração), fornece $\bar{f} \sim 5 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$ em 86 km de altitude (para detalhes ver Takahashi, 1981). Tendo em vista a vida média longa de $\text{OH}^*(X^2\Pi)$ na mesopausa (da ordem de milissegundos), o número de colisões durante o tempo de vida radiativo será maior do que 100, garantindo o equilíbrio térmico das populações rotacionais com o ambiente (equilíbrio de Boltzmann). Assim, a temperatura rotacional é representativa da temperatura cinética do gás ambiente.

A faixa de medidas das temperaturas da mesopausa, deduzidas do *nightglow* do OH^* , em diferentes localizações geográficas e em diferentes datas, situa-se geralmente entre 150 e 250 K. As variações semidiurnas da temperatura rotacional têm sido citadas como uma forte evidência de propagação ascendente de ondas de gravidade-acústica e marés através da média atmosfera (Walterscheid *et al.*, 1987).

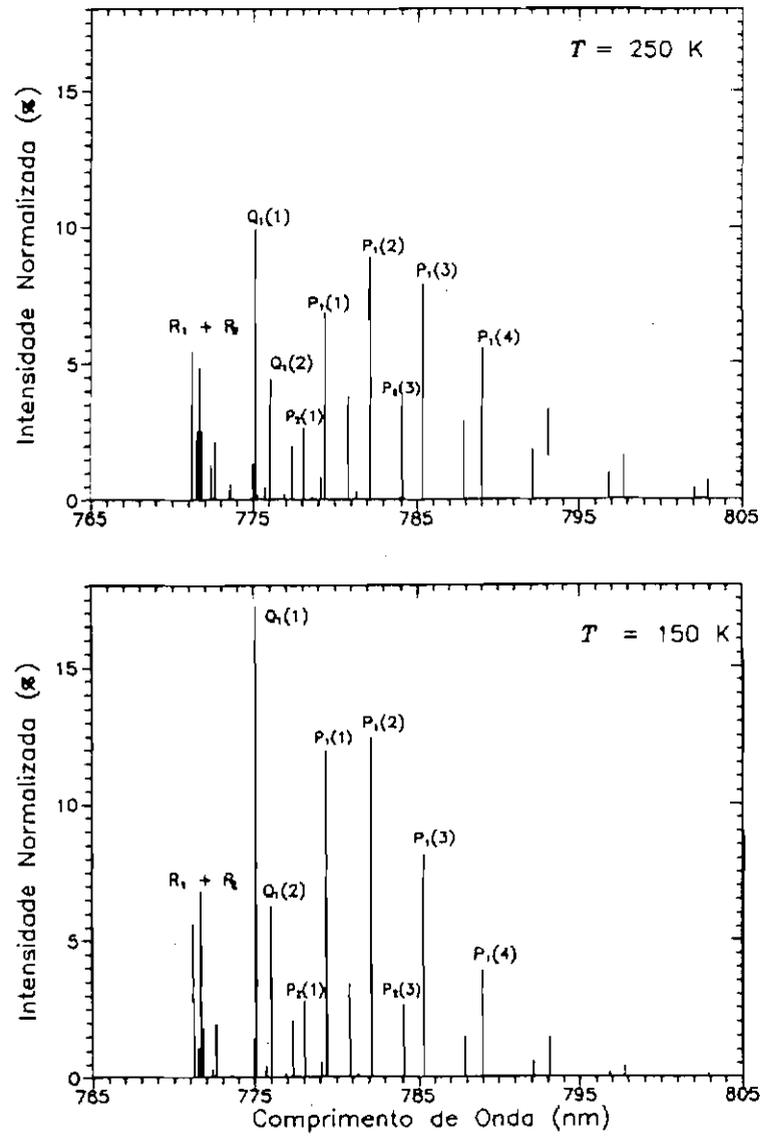
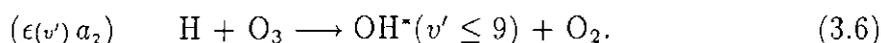


Fig. 3.3 - Espectro teórico da banda de Meinel (9-4) para $T = 250 \text{ K}$ (acima) e $T = 150 \text{ K}$ (abaixo), calculado pelo programa spectOH.bas

3.3 - FOTOQUÍMICA DAS BANDAS DE MEINEL

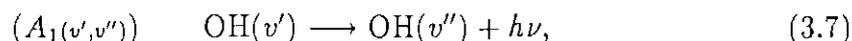
A reação exotérmica hidrogênio-ozônio, inicialmente proposta por Bates e Nicolet (1950), é o mecanismo mais efetivo para a produção de $\text{OH}^*(v')$ na mesopausa:



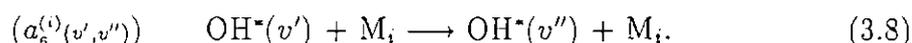
A energia de 3,34 eV liberada nesta reação é suficiente para permitir a ocupação dos níveis vibracionais até $v' = 9$, em plena concordância com as observações espectroscópicas no *nightglow* das bandas de OH^* .

Embora a reação hidrogênio-ozônio seja reconhecida como principal fonte de $\text{OH}^*(v' \leq 9)$ na mesopausa, ainda não existe consenso a respeito da distribuição populacional nos níveis vibracionais de $v' = 1$ a $v' = 9$ entre os valores teóricos e observados.

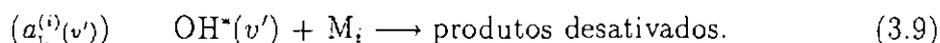
É sabido que a reação (3.6) produz OH^* preferencialmente nos níveis $v' = 7, 8$ e 9 (Klenerman e Smith, 1987), e que, os níveis vibracionais inferiores, responsáveis pela maior parte das bandas de Meinel observadas no espectro do *nightglow*, devem ser ocupados como uma conseqüência do processo de cascata radiativa,



ou do processo de transferência de energia vibracional (Streit e Johnston, 1976),

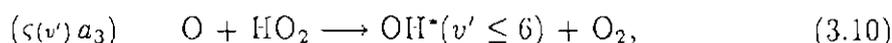


A perda fotoquímica em cada um dos níveis pode ser controlada pelos processos (3.7) e (3.8) ou através de reações de *quenching*,



No entanto, as taxas de emissão das bandas de $\text{OH}^*(v' \leq 6)$, calculadas pelos processos (3.6) a (3.9), fornecem valores bem menores do que a maior parte das medidas de *nightglow* de $\text{OH}^*(v' \leq 6)$ divulgadas recentemente (destaca-se o trabalho observacional de Sivjee e Hamwey, 1987).

Algumas propostas surgiram para explicar essa discrepância. Por exemplo, uma fonte secundária para a produção de $\text{OH}^*(v' \leq 6)$, envolvendo o radical HO_2 (Krassovsky, 1972),



deveria ser adequada, visto que a energia liberada ($\simeq 2,3$ eV) é suficiente para excitar estes níveis vibracionais. Entretanto, experimentos em laboratório e alguns argumentos da física básica desacreditam a eficiência da reação (3.10), a menos que ela envolva reagentes em estados excitados (Kaye, 1988).

Um modelo alternativo proposto por McDade e Llewellyn (1987, 1988), sugere a substituição do processo (3.8) por um mecanismo de desativação vibracional súbita (*sudden death quenching*) dos níveis vibracionais superiores,



As diferenças entre a distribuição vibracional observada e calculada das bandas de Meinel permanecem ainda não resolvidas, e constitui-se num dos tópicos de pesquisa relevantes do *nightglow* destas emissões.

Admitindo as condições de equilíbrio estacionário, em uma altitude fixa interna à camada de OH^* , as taxas de produção e perda são balanceadas, tal que a taxa volumétrica de emissão, \mathcal{E} , em fótons $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ é dada por:

$$\mathcal{E}_{\text{OH}^*(v',v'')} = \frac{A_1(v',v'') \epsilon(v') a_2 n(\text{H}) n(\text{O}_3) + A_1(v',v'') \sum_{v=v'+1}^9 \mathcal{E}_{\text{OH}^*(v,v')} \left\{ 1 + \frac{1}{A_1(v,v')} \sum_i a_6^{(i)}(v,v') n(M_i) \right\}}{\sum_{v=0}^{v'-1} A_1(v',v) + \sum_i a_6^{(i)}(v') n(M_i)}. \quad (3.12)$$

No caso particular da banda (9-4), a equação (3.12) reduz-se para

$$\mathcal{E}_{\text{OH}^*(9,4)} = \frac{A_1(9,4) \epsilon(9) a_2 n(\text{H}) n(\text{O}_3)}{\sum_{v=0}^8 A_1(9,v) + \sum_i a_6^{(i)}(9) n(M_i)}. \quad (3.13)$$

Os detalhes referentes à notação utilizada nesta seção, no que tange, principalmente, aos coeficientes cinéticos de reação, serão considerados no Capítulo 7.

Os perfis de altitude relativos às bandas de Meinel são objetos de grande interesse aeronômico, devido, sobretudo, a larga faixa espectral e acentuada intensidade que os caracterizam. Por conseguinte, eles têm proporcionado informações relevantes a respeito das densidades numéricas (mol. cm^{-3}) de certos constituintes minoritários da mesopausa, especialmente o oxigênio atômico.

Numa compilação recente, Baker e Stair (1988) catalogaram um total de 55 perfis de emissão das bandas de Meinel, medidos por instrumentação a bordo de foguete, nestes últimos 33 anos. Determinou-se que a altitude de máxima emissão ocorreu entre 85-90 km, numa camada de espessura média por volta de 6-10 km.

A Figura 3.4 mostra os perfis de altitude das densidades de OH^* , para os níveis v' de 5 a 9, deduzidas a partir de medidas *in situ* na seqüência $\Delta v = 2$ das

bandas de Meinel, centradas em $\lambda 1,55$, $\lambda 1,63$ e $\lambda 1,69 \mu\text{m}$ (faixa do infravermelho próximo). Lopez-Moreno *et al.* (1987) introduziram um método capaz de fornecer, com boa precisão, a distribuição em altitude de $\text{OH}^*(v)$. A seguinte figura mostra uma separação de 1–2 km entre os picos de altitude dos dois conjuntos vibracionais na emissão de OH^* , $v' < 6$ e $v' > 6$. Um dos interesses aeronômicos no conhecimento da distribuição vertical das emissões de $\text{OH}^*(v)$, de diferentes níveis vibracionais, diz respeito a possibilidade de obtenção do gradiente de $n(\text{O})$ na mesopausa (McDade e Llewellyn, 1988).

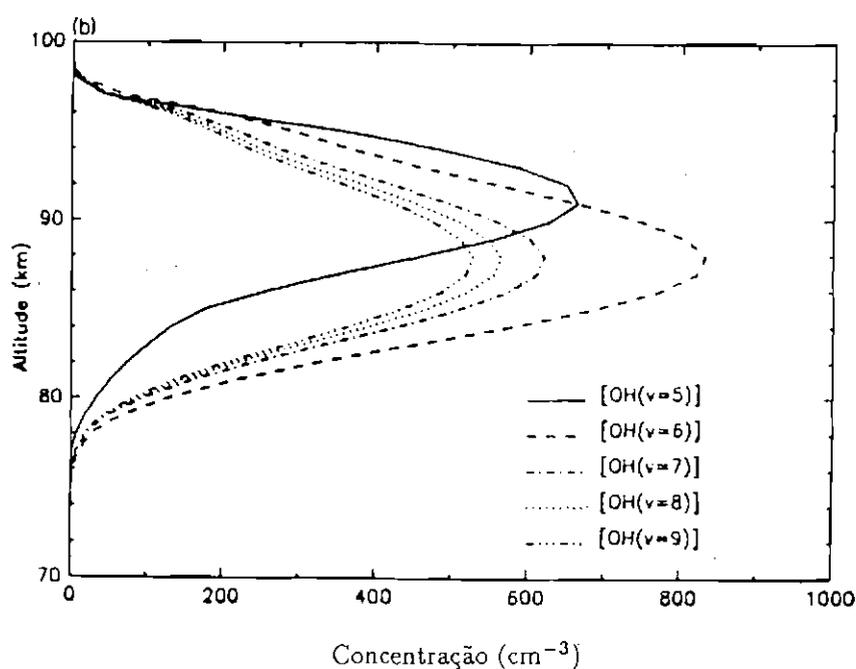


Fig. 3.4 - Distribuição em altitude da densidade de $\text{OH}(v')$ para os níveis $v' = 5$ a 9.

FONTE: Adaptada de Lopez-Moreno *et al.* (1987), p. 1032.

CAPÍTULO 4

AQUISIÇÃO E REDUÇÃO DOS DADOS

O fotômetro MULTI2, projetado em 1986 por Hisao Takahashi e Agnaldo Eras,⁸ destina-se a medir radiância associada às emissões de *nightglow* do oxigênio atômico ($O\text{I } \lambda 557,7 \text{ nm}$, $\lambda 630,0 \text{ nm}$ e $\lambda 777,4 \text{ nm}$), do sódio mesosférico ($\text{Na } D_1$ e D_2), da hidroxila ($\text{OH}^*(9-4)$) e do oxigênio molecular ($\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$). Alguns resultados de observações efetuadas pelo MULTI2 já foram descritos nos trabalhos de Takahashi *et al.* (1989, 1990) e Fagundes *et al.* (1992).

O método convencional de determinação da temperatura rotacional foi exposto nos capítulos anteriores. A maior parte das medidas (*e.g.*, Sivjee *et al.*, 1972; Takahashi *et al.*, 1974; Sivjee e Hamwey, 1987) têm adotado a técnica do ajuste pelos mínimos quadrados à relação que envolve as intensidades de duas ou mais linhas rotacionais pertencentes aos diversos ramos da molécula. Outras medidas (*e.g.*, Meriwether, 1975) monitoram somente duas linhas rotacionais de um mesmo ramo. A temperatura rotacional é então inferida da razão deste par. De qualquer modo, admite-se implicitamente que a camada de emissão inteira seja isotérmica. Um método mais aprimorado para a obtenção da temperatura rotacional, desenvolvido recentemente por Schubert *et al.* (1990), permite obter a diferença de temperatura através da camada de emissão, bem como a magnitude do gradiente de temperatura sobre a espessura da região de emissão. Esta técnica pode ser muito útil no estudo da propagação das ondas de gravidade-acústica através da mesopausa.

No presente trabalho, o método padrão de medida foi adotado, tendo em vista a sua relativa simplicidade e precisão. Este capítulo visa, sobretudo, fornecer um delineamento da técnica utilizada pelo MULTI2 para determinação da temperatura rotacional do $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $\text{OH}^*(9-4)$.

⁸O fotômetro MULTI2 foi construído na oficina mecânica do Laboratório LASER/INPE, sob supervisão de Agnaldo Eras. Consta-se que a primeira calibração foi realizada em Dezembro de 1986, iniciando-se as observações logo em seguida.

4.1 - BREVE DESCRIÇÃO DO MULTI2

O fotômetro multicanal MULTI2 pode ser esquematizado em 3 unidades básicas: a unidade do fotômetro propriamente dita, a unidade de interface e a unidade de aquisição de dados e controle do equipamento. A Figura 4.1 apresenta um diagrama de blocos dessa representação.

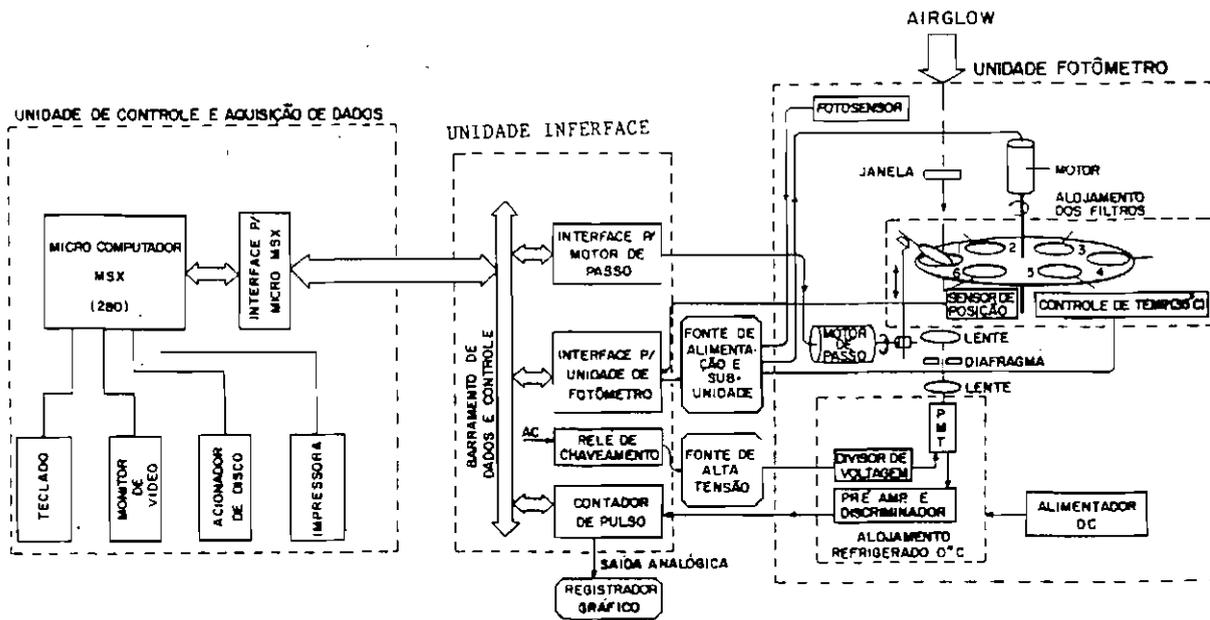


Fig. 4.1 - Diagrama de blocos do fotômetro multicanal MULTI2.

A unidade do fotômetro consiste basicamente de um disco com cinco filtros de interferência (banda passante) e um obturador opaco para medida do ruído térmico; uma lente e um diafragma que determinam o campo de visão; um tubo fotomultiplicador; e os instrumentos eletrônicos que registram os sinais. O fotômetro envolve um campo de visão total de 2° , com uma abertura efetiva de 50 mm de diâmetro. Cada linha (ou banda) de emissão e o ruído de fundo correspondente são medidos separadamente, abrangendo uma varredura de 8,0 nm, a partir do comprimento de onda central do filtro. Quando um dos filtros é colocado no eixo óptico, um motor de passo faz com que o filtro incline-se possibilitando a varredura em comprimento de onda. A relação entre o ângulo de inclinação (θ) do filtro e o deslocamento em comprimento de onda ($\Delta\lambda$) é expressa por (Eather e Reasoner, 1969):

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_c} = -\frac{\theta^2}{2\mu^2}, \quad (4.1)$$

onde λ_c é o comprimento de onda central de cada filtro em $\theta = 0$ e μ é o índice

de refração do filtro. Para evitar a influência da variação da temperatura ambiente sobre os filtros, mantêm-se o alojamento em $28 \pm 0,5^\circ\text{C}$.

A unidade de aquisição de dados e controle do equipamento consiste de uma CPU (Z80) e uma interface para acoplar com um micro-computador padrão MSX. Ao final, os dados são armazenados em discos flexíveis, e uma saída analógica é usada para monitorar o sistema.

Uma seqüência de observação do céu noturno com os cinco filtros mais o obturador leva aproximadamente 3,3 min. Considerando que o período mínimo de uma onda de gravidade interna é igual ao período de Brunt Väisälä (~ 5 min na região da mesopausa), esse intervalo de medida é apropriado para observar ondas de gravidade de períodos relativamente curtos.

4.2 - CALIBRAÇÃO

A fim de obter-se a intensidade de uma emissão de *nightglow*, deve-se avaliar as características dos filtros (curvas de transmitância) e as sensibilidades absolutas do fotômetro em diferentes posições (ou canais) do sistema. A idéia fundamental é a de realizar uma radiometria comparativa entre a radiância de uma fonte de luz padrão conhecida e a radiância de *nightglow*.

4.2.1 - Curvas de Transmitância

A resposta do fotômetro a uma luz quase-monocromática de potência de radiação espectral $\Phi_{r,\lambda}$ (W nm^{-1}) pode ser expressa como:

$$J(\lambda) = C e(\lambda) T(\lambda) \Phi_{r,\lambda} \Delta\lambda, \quad (4.2)$$

onde $J(\lambda)$ representa a resposta do fotômetro em pulsos por segundo; $e(\lambda)$ a eficiência quântica da fotomultiplicadora; $T(\lambda)$ a transmitância do filtro em função do comprimento de onda λ ; C um fator instrumental dimensional e $\Delta\lambda$ a resolução espectral do monocromador. Então, a transmitância é dada por:

$$T(\lambda) = \frac{J_1(\lambda)}{C e(\lambda) \Phi_{r,\lambda} \Delta\lambda}. \quad (4.3)$$

Na prática a transmitância é obtida fazendo-se uma varredura extensa no entorno do comprimento de onda central do canal. Sem o filtro de interferência, a resposta do fotômetro é

$$J^*(\lambda) = C e(\lambda) \Phi_{r,\lambda} \Delta\lambda. \quad (4.4)$$

Através do quociente entre as Equações (4.2) e (4.4):

$$T(\lambda) = \frac{J(\lambda)}{J^*(\lambda)}, \quad (4.5)$$

pode-se determinar a curva de transmitância, $T = T(\lambda)$, do filtro.

A fim de melhor avaliar as particularidades de um filtro, determina-se o valor percentual da transmitância máxima, T_{\max} , i.e., a relação (4.5) obtida no pico da transmissão. Assim, a largura efetiva do filtro, $\Delta\lambda_{\text{eff}}$, pode ser calculada usando $T(\lambda)$ relativo a $T(\lambda=\lambda_{\max}) = 1$, definindo a transmitância relativa $t(\lambda) = \frac{T(\lambda)}{T(\lambda_{\max})}$, tal que,

$$\Delta\lambda_{\text{eff}} = \int t(\lambda) d\lambda. \quad (4.6)$$

De modo geral, estes filtros têm uma largura de transmissão efetiva da ordem de 1,0 nm. Como a resolução do monocromador deve ser maior que essa largura, usou-se um monocromador McPherson modelo 270 com rede holográfica de 1200 linhas/mm, cuja resolução é de aproximadamente 0,1 nm. As curvas de transmitância para os filtros do $\text{OH}^*(9-4)$ e $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ são apresentadas na Seção 4.3.

4.2.2 - Sensibilidade Absoluta

A montagem experimental usada para determinar a sensibilidade absoluta do fotômetro é apresentada na Figura 4.2. A configuração geométrica da trajetória do raio luminoso é baseada no trabalho de Yano e Kiyama (1975). Empregam-se uma fonte de luz padrão de calibração Eppley ES-8315 e dois anteparos difusores de MgO , cuja reflectância é tomada pelo valor constante de 0,98 (Kulkarni e Sanders, 1964).

A radiância espectral de uma placa branca, L_λ ($\text{W cm}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{nm}^{-1}$), que é proporcional à irradiância espectral na sua superfície, E_λ ($\text{W cm}^{-2} \text{nm}^{-1}$), está relacionada com a propriedade de espalhamento da luz na superfície da placa. Para os difusores 1 e 2,

$$L_{\lambda,s}^{(1)} = \frac{K_s^{(1)}}{\pi} E_\lambda^{(1)}, \quad (4.7)$$

$$L_{\lambda,\varepsilon}^{(2)} = \frac{K_\varepsilon^{(2)}}{\pi} E_\lambda^{(2)}, \quad (4.8)$$

onde $K = K(\lambda, \mathbf{x})$ representa o fator de difusividade (reflectância), que normalmente depende do espectro (λ) e da direção de incidência da radiação (\mathbf{x}).

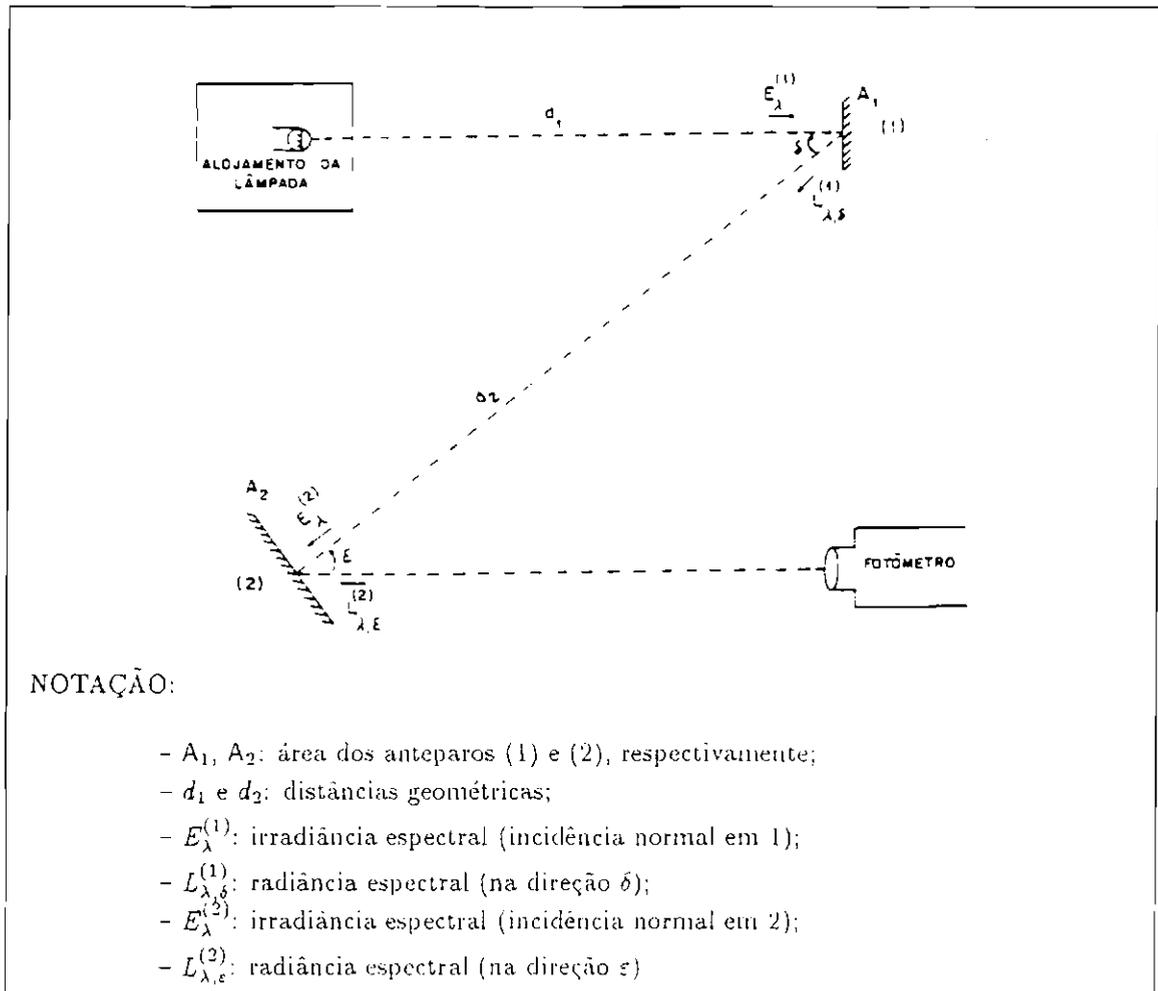


Fig. 4.2 - Montagem experimental usada para determinar a sensibilidade absoluta.

Da lei de Lambert:

$$E_\lambda^{(2)} = L_{\lambda,\delta}^{(1)} \frac{A_1 \cos \delta}{d_2^2}, \quad (4.9)$$

onde A_1 e d_2 encontram-se definidos na Figura 4.2. Usando a equação (4.8):

$$L_{\lambda,\epsilon}^{(2)} = E_\lambda^{(1)} \frac{K_\delta^{(1)} K_\epsilon^{(2)}}{\pi^2} \frac{A_1 \cos \delta}{d_2^2} \quad (4.10)$$

O valor de $E_\lambda^{(1)}$ pode ser calculado pela fonte de luz padrão Eppley, cuja irradiância espectral, $E_\lambda^{(0)}$, é fornecida pelo fabricante. Logo, usando novamente a lei de Lambert,

$$E_\lambda^{(1)} = \left(\frac{d_0}{d_1}\right)^2 E_\lambda^{(0)}, \quad (4.11)$$

onde $d_0 = 50$ cm é a distância padrão de calibração usada pelo fabricante para estabelecer a curva de irradiância espectral da lâmpada Eppley.

Finalmente, substituindo a equação (4.11) em (4.10), obtem-se:

$$L_{\lambda,\varepsilon}^{(2)} = \left(\frac{d_0}{d_1}\right)^2 E_{\lambda}^{(0)} \frac{K_{\delta}^{(1)} K_{\varepsilon}^{(2)} A_1 \cos \delta}{\pi^2 d_2^2} \quad (4.12)$$

É útil exprimir a radiância em unidades Rayleighs. Define-se, por conveniência uma taxa de emissão aparente ou intensidade⁹ de *nightglow* e representa-se pelo símbolo B (em geral, uma quantidade não espectral). A equação de conversão é dada por:

$$B = \frac{4\pi}{10^6} \frac{\lambda}{hc} L \simeq 6,328 \times 10^{10} \lambda L, \quad (4.13)$$

onde λ na última igualdade deve ser expresso em unidades nm.

Assim, conhecido $B_{\lambda,\varepsilon}^{(2)}$ (das equações 4.12 e 4.13) pode-se determinar a sensibilidade absoluta do fotômetro, S ($R^{-1} s^{-1}$), para cada comprimento de onda desejado, medindo o número de pulsos por segundo registrado pelo fotômetro e calculando a largura efetiva dos filtros. Da equação (4.2), define-se a sensibilidade absoluta:

$$S(\lambda) = \frac{J(\lambda)}{B_{\lambda,\varepsilon}^{(2)} \Delta \lambda_{\text{eff}}}. \quad (4.14)$$

A Tabela 4.1 sintetiza os resultados da calibração do MULT12 para os filtros que medem as emissões de OH^* ($9-4$) e $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$. Estes valores referem-se à última calibração, realizada em Julho de 1992 e, por conseguinte, devem ser tomados neste trabalho apenas como valores de referência.

É importante mencionar que existem variações na sensibilidade do fotômetro, tanto a curto quanto a longo prazo. Para detectar variações de curto prazo, usa-se uma lâmpada subpadrão L2, a fim de corrigir, periodicamente, a sensibilidade absoluta dos filtros em cada canal usado.

⁹Intensidade de radiação, I , de acordo com a metrologia convencional, é o fluxo (Watt) por unidade de ângulo sólido em uma dada direção. Deste modo o termo intensidade aqui empregado não pode ser confundido com sua definição padrão.

TABELA 4.1 - RESULTADOS DA CALIBRAÇÃO DO MULTI2

FILTRO	POS.	λ_c (nm)	λ_{max} (nm)	$\Delta\lambda_{eff}$ (nm)	T_{max} (%)	B_λ (R nm ⁻¹)	$J_{(ESS315)}$ (cont.s ⁻¹)	S (R ⁻¹ s ⁻¹)
F4 OH* (9-4)	P1	777,46	777,44	1,28	23,0	501,31	12693	19,8
	P2	775,07	775,09	1,64	14,6	498,30	12026	14,7
	P3	771,50	771,50	1,98	11,3	493,52	11812	12,1
	P4	768,47	768,45	2,14	9,4	488,66	11555	11,0
F5 O ₂ (b ¹ Σ _g ⁺)	P1	868,0	868,23	1,47	14,7	601,00	14612	16,5
	P2	866,0	865,75	1,43	14,3	599,09	14282	16,6
	P3	857,2	857,20	2,03	20,3	591,06	13045	10,9

4.3 - CÁLCULO DA TEMPERATURA ROTACIONAL

De uma maneira geral, a resposta do fotômetro a uma emissão de *nightglow* pode ser expressa como (Takahashi, 1981):

$$J_\nu = B_\nu S_\nu + \int_\lambda S_\nu(\lambda) G_\lambda(\lambda) d\lambda. \quad (4.15)$$

B_ν representa a intensidade da linha ν observada, em unidades R; $S_\nu(\lambda)$ a sensibilidade do fotômetro para um dado comprimento de onda, em unidades R⁻¹s⁻¹; e $G_\lambda(\lambda)$ a intensidade espectral do contínuo da radiação de fundo, em unidades R nm⁻¹.

Tendo em vista a definição da largura efetiva do filtro (equação 4.6), a equação (4.15) pode ser aproximada por:

$$J_\nu \simeq B_\nu S_\nu + S_\nu(\lambda_{max}) G_\lambda(\lambda_{max}) (\Delta\lambda_{eff})_k, \quad (4.16)$$

onde as quantidades S e G_λ são calculadas em $\lambda = \lambda_{max}$ (picos de transmissão dos filtros).

4.3.1 - Filtro F4 – OH* (9-4)

Esse filtro é usado para medir as emissões nos comprimentos de onda de 777,4 nm (posição 1), que corresponde a uma linha do oxigênio atômico; 775,1 nm (posição 2), que corresponde ao ramo Q da banda (9-4) do OH; 771,5 nm (posição 3), que corresponde ao ramo R dessa banda; e 768,0 nm (posição 4), usado para estimar a radiação de fundo.

A seguir, descreve-se, em detalhe, a metodologia empregada para a determinação da temperatura rotacional de $\text{OH}^*(9-4)$.

De acordo com a equação (4.16), a resposta do fotômetro em cada posição (P_1, \dots, P_4) pode ser expressa como:

$$J_1 = B_{777,4} S_1 + \sum_{\alpha}^{Q+P} B_{\alpha} (S_1)_{\alpha} + G S_1 (\Delta\lambda_{\text{eff}})_1, \quad (4.17)$$

$$J_2 = \sum_{\beta}^Q B_{\beta} (S_2)_{\beta} + G S_2 (\Delta\lambda_{\text{eff}})_2, \quad (4.18)$$

$$J_3 = \sum_{\gamma}^R B_{\gamma} (S_3)_{\gamma} + G S_3 (\Delta\lambda_{\text{eff}})_3, \quad (4.19)$$

$$J_4 = G S_4 (\Delta\lambda_{\text{eff}})_4, \quad (4.20)$$

onde α , β e γ representam as linhas rotacionais dos ramos $Q+P$, Q e R , respectivamente. A Figura 4.3 exibe o espectro teórico do $\text{OH}^*(9-4)$ nessa faixa de comprimento de onda, e as curvas de transmitância nas quatro posições.

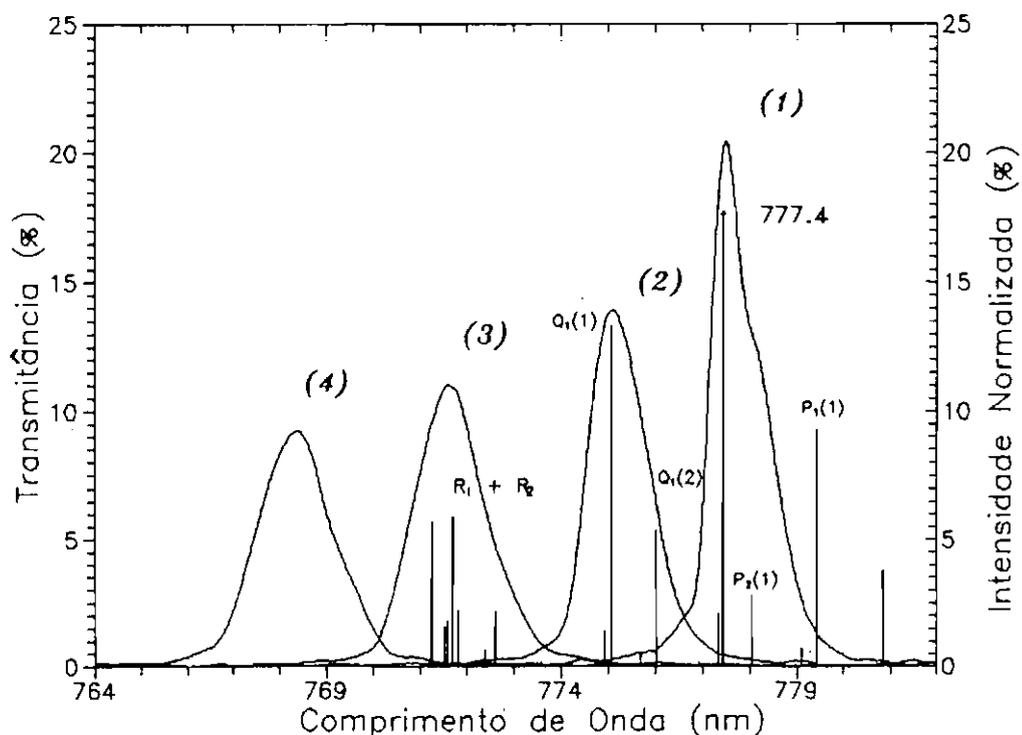


Fig. 4.3 - Espectro do $\text{OH}^*(9-4)$ e as curvas de transmitância. Os números referem-se às diferentes posições do filtro F4.

A resposta J_1 da posição P_1 do filtro F4, destinada a registrar a intensidade de *nightglow* da linha $\lambda 777,4$ nm do oxigênio atômico (vide Figura 4.3), não será estudada no presente trabalho.

Com relação às posições P_2, P_3 e P_4 , considere a definição da seguinte relação sintética:

$$A_k = \frac{S_k (\Delta\lambda_{\text{eff}})_k}{S_m (\Delta\lambda_{\text{eff}})_m}, \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, m-1 \text{ e} \quad (4.21)$$

m = número de posições do filtro.

Neste caso, tomando $m = 4$, as equações (4.18), (4.19) e (4.20) podem ser reescritas em termos das intensidades espectroscópicas normalizadas e das transmitâncias relativas,

$$J_2 - A_2 J_4 = S_2 B_{\text{OH}} \cdot \sum_{\beta}^Q i_{\beta}(t_2)_{\beta}, \quad (4.22)$$

$$J_3 - A_3 J_4 = S_3 B_{\text{OH}} \cdot \sum_{\gamma}^R i_{\gamma}(t_3)_{\gamma}, \quad (4.23)$$

que, dividindo membro a membro, resulta em

$$\frac{\sum_{\gamma}^R i_{\gamma}(t_3)_{\gamma}}{\sum_{\beta}^Q i_{\beta}(t_2)_{\beta}} = \left(\frac{S_2}{S_3}\right) \frac{J_3 - A_3 J_4}{J_2 - A_2 J_4}. \quad (4.24)$$

Definindo-se a relação teórica

$$\mathcal{M}_{R,Q} = \frac{\sum_{\gamma}^R i_{\gamma}(t_3)_{\gamma}}{\sum_{\beta}^Q i_{\beta}(t_2)_{\beta}}, \quad (4.25)$$

que é monotonicamente dependente da temperatura rotacional, pode-se calcular uma função de ajuste inversa do tipo polinomial de grau- p (*polynomial fitting*),

$$T = T(\mathcal{M}_{R,Q}) = \sum_{n=0}^p a_n (\mathcal{M}_{R,Q})^n, \quad (4.26)$$

para cada valor de $\mathcal{M}_{R,Q}$ dado pela equação (4.25). A partir dos dados observacionais J_3, J_2, J_4 e dos resultados da calibração do MULTI2 (A_2, A_3, S_2 e S_3), obtêm-se:

$$\{\mathcal{M}_{R,Q}\}_{\text{obs.}} = \left(\frac{S_2}{S_3}\right) \frac{J_3 - A_3 J_4}{J_2 - A_2 J_4}. \quad (4.27)$$

Usando então a função de ajuste (4.26), determina-se enfim a temperatura rotacional da emissão $\text{OH}^*(9-4)$,

$$T = \sum_{n=0}^p a_n (\{\mathcal{M}_{R,Q}\}_{\text{obs.}})^n. \quad (4.28)$$

Em síntese, a razão entre as intensidades espectroscópicas dos ramos rotacionais R e Q fornece a temperatura rotacional da banda de Meinel (9-4).

Usando o mesmo raciocínio, pode-se estimar a intensidade, B , da emissão OH(9-4). Define-se inicialmente a relação teórica

$$SM_Q = \sum_{\beta}^Q i_{\beta} (t_2)_{\beta}. \quad (4.29)$$

Variando a temperatura T , encontra-se uma função de ajuste polinomial de grau- q ,

$$SM_Q = SM_Q(T) = \sum_{n=0}^q b_n T^n. \quad (4.30)$$

Usando o valor para T , calculado pelo função de ajuste (4.28), acha-se $\{SM_Q\}_{obs.}$, por intermédio da expressão (4.30). Finalmente, das equações (4.22) e (4.29),

$$B_{OH^*} = \frac{J_2 - A_2 J_4}{S_2 \{SM_Q\}_{obs.}}. \quad (4.31)$$

As funções polinomiais de ajuste (4.26) e (4.30) são mostradas na Figura 4.4. Nota-se que existe uma dependência quase linear entre a temperatura rotacional e a razão de intensidades $M_{R,Q}$. A relação SM_Q comporta-se como uma função exponencial decrescente da temperatura rotacional (distribuição de Boltzmann).

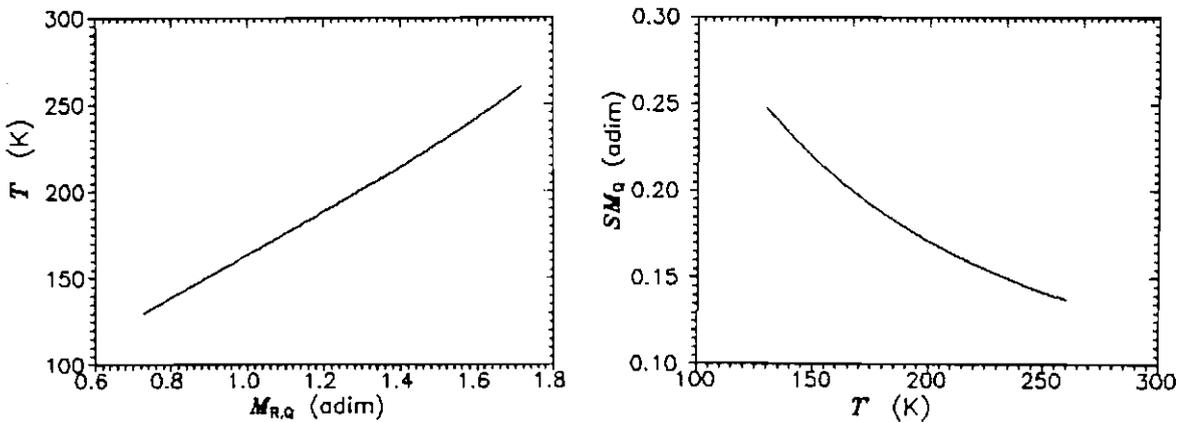


Fig. 4.4 - Polinômios de ajuste $T = T(M_{R,Q})$ e $SM_Q = SM_Q(T)$, no caso da banda OH*(9-4).

4.3.2 - Filtro F5 -- $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$

Esse filtro mede a banda (0-1), pertencente ao sistema atmosférico do O_2 , em três comprimentos de onda distintos: $\lambda 868,1$ nm (posição P_1), que corresponde ao centro da mistura dos ramos $P+Q$; $\lambda 866,0$ nm (posição P_2), que corresponde ao pico desta mistura de ramos; e $\lambda 857,2$ nm (posição P_3), usado para conhecer o radiação de fundo. As curvas de transmitância de cada posição, juntamente com uma representação do espectro da banda em questão, são apresentados na Figura 4.5.

A determinação da temperatura rotacional do $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ torna-se mais suscetível às imprecisões, desde que as intensidades espectroscópicas (vide Figura 4.5) são mais fracas e as linhas rotacionais encontram-se muito próximas entre si. A metodologia de cálculo da temperatura desenvolvida aqui é semelhante àquela utilizada na seção anterior. Porém, neste caso, a obtenção de T dá-se através do quociente entre o centro da mistura dos ramos $P+Q$ e o pico desta mistura.

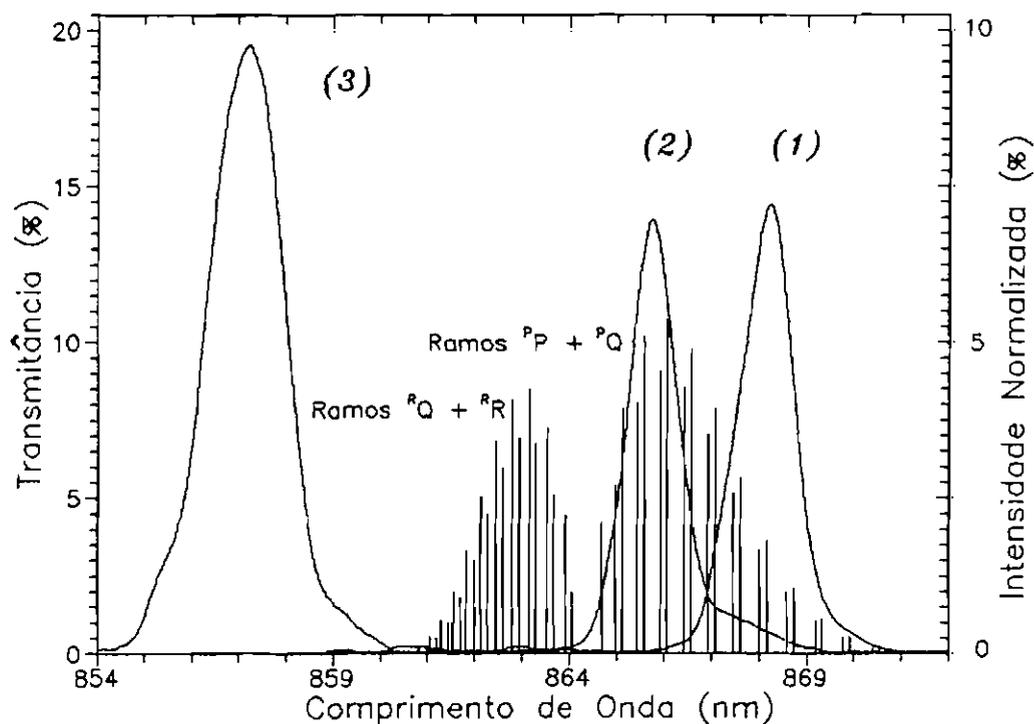


Fig. 4.5 - Espectro do $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e as curvas de transmitância. Os números referem-se às diferentes posições do filtro F5.

De acordo com a equação (4.16), a resposta do fotômetro em cada posição é dada por:

$$J_1 = \sum_{\alpha}^{P+Q} B_{\alpha} (S_1)_{\alpha} + G S_1 (\Delta\lambda_{\text{eff}})_1, \quad (4.32)$$

$$J_2 = \sum_{\beta}^{P+Q} B_{\beta} (S_2)_{\beta} + G S_2 (\Delta\lambda_{\text{eff}})_2, \quad (4.33)$$

$$J_3 = G S_3 (\Delta\lambda_{\text{eff}})_3, \quad (4.34)$$

onde α e β representam as linhas rotacionais dos ramos P+Q.

As Equações (4.32), (4.33) e (4.34) podem ser colocadas na forma:

$$J_1 - A_1 J_3 = S_1 B_{O_2} \sum_{\alpha}^{P+Q} i_{\alpha} (t_1)_{\alpha}, \quad (4.35)$$

$$J_2 - A_2 J_3 = S_2 B_{O_2} \sum_{\beta}^{P+Q} i_{\beta} (t_2)_{\beta}, \quad (4.36)$$

onde foi usada a relação sintética (4.21) para $m = 3$. Dividindo membro a membro,

$$\frac{\sum_{\alpha}^{P+Q} i_{\alpha} (t_1)_{\alpha}}{\sum_{\beta}^{P+Q} i_{\beta} (t_2)_{\beta}} = \left(\frac{S_2}{S_1} \right) \frac{J_1 - A_1 J_3}{J_2 - A_2 J_3}. \quad (4.37)$$

Analogamente ao filtro F4, definindo-se a relação teórica

$$\mathcal{M}_{P+Q} = \frac{\sum_{\alpha}^{P+Q} i_{\alpha} (t_1)_{\alpha}}{\sum_{\beta}^{P+Q} i_{\beta} (t_2)_{\beta}}, \quad (4.38)$$

que é dependente da temperatura rotacional, pode-se calcular uma função de ajuste inversa do tipo polinomial de grau- p ,

$$T = T(\mathcal{M}_{P+Q}) = \sum_{n=0}^p a_n (\mathcal{M}_{P+Q})^n, \quad (4.39)$$

para cada valor de \mathcal{M}_{P+Q} dado pela equação (4.38). A partir dos dados observacionais J_1 , J_2 , e dos resultados da calibração do MULTIF (A_1 , A_2 , S_1 e S_2), obtém-se:

$$\{\mathcal{M}_{P+Q}\}_{\text{obs.}} = \left(\frac{S_2}{S_1} \right) \frac{J_1 - A_1 J_3}{J_2 - A_2 J_3}. \quad (4.40)$$

Usando então a função de ajuste (4.39), determina-se a temperatura rotacional da emissão $O_2(0-1)$,

$$T = \sum_{n=0}^p a_n (\{\mathcal{M}_{P+Q}\}_{\text{obs.}})^n. \quad (4.41)$$

A intensidade da emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ é calculada definindo a seguinte relação teórica:

$$SM_{P+Q} = \sum_{\beta}^{P+Q} i_{\beta} (t_2)_{\beta}. \quad (4.42)$$

Variando a temperatura T , achamos uma função de ajuste polinomial de grau- q

$$SM_{P+Q} = SM_{P+Q}(T) = \sum_{n=0}^q b_n T^n. \quad (4.43)$$

Usando o valor para T , calculado pelo ajuste (4.41), achamos $\{SM_{P+Q}\}_{obs.}$. Finalmente, das equações (4.36) e (4.42),

$$B_{O_2} = \frac{J_2 - A_2 J_3}{S_2 \{SM_{P+Q}\}_{obs.}}. \quad (4.44)$$

As funções polinomiais de ajuste (4.38) e (4.42) são mostradas na Figura 4.6. O comportamento de ambas as curvas é similar àquele exibido na Figura 4.4.

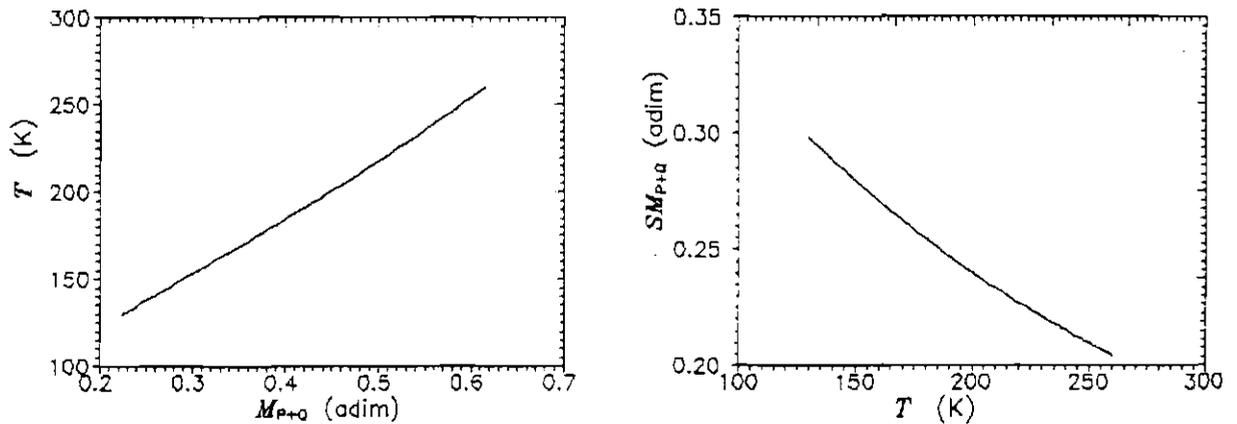


Fig. 4.6 - Polinômios de ajuste $T = T(M_{P+Q})$ e $SM_{P+Q} = SM_{P+Q}(T)$, no caso da banda $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$.

4.4 - CONTAMINAÇÃO ESPECTRAL

Praticamente todos os instrumentos ópticos situados em solo, e projetados para medir luminescência atmosférica, exigem um céu límpido.¹⁰ O MULTI2 não é exceção à regra. Embora as emissões de $\text{OH}^*(9-4)$ e $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ sejam suficientemente intensas para transporem camadas de nuvens pouco espessas, o espalhamento de radiações incoerentes pelas nuvens, tal como as luzes artificiais noturnas nas circunvizinhanças do ponto de observação (por exemplo, luzes da cidade), tornam as medidas muito discutíveis. A reflexão das luzes através das nuvens causa um crescimento repentino e drástico no sinal do fotômetro. Aspectos físico-químicos relacionados à presença de nuvens, como a absorção pelo vapor d'água e o espalhamento Mie pelos aerossóis devem também ser considerados. Por exemplo, a presença do vapor d'água dinamiza o crescimento de tamanho das partículas higroscópicas, causando um aumento da opacidade atmosférica.

A informação contida nos canais que monitoram a radiação de fundo na vizinhança espectral das emissões de $\text{OH}^*(9-4)$ e $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ é imprescindível, pois sem esta informação, dificilmente poder-se-ia distinguir entre as flutuações devidas ao *nightglow* destas emissões e as flutuações relacionadas às condições de espalhamento atmosférico. O monitoramento da radiação de fundo permite, então, a rejeição dos dados contaminados pela presença de nuvens. Por esta razão, o fotômetro multicanal MULTI2 usa dois canais adicionais, cujo objetivo final é a redução da contaminação espectral das medidas da taxa de emissão e temperatura rotacional de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $\text{OH}^*(9-4)$.

A Figura 4.7 exemplifica, através da noite de 21/22 de junho de 1990, o método de identificação das variações na transmissão atmosférica adotado neste trabalho. São mostrados nessa figura o comportamento noturno da intensidade da radiação de fundo, $G(\lambda)$, para o filtro F5 (posição P_3), bem como o comportamento da resposta fotométrica, J , em Rayleighs, para a posição P_2 do filtro F4 ($\text{OH}^*(9-4)$) e para a posição P_3 do filtro F5 ($\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$). Os valores de $G(\lambda)$ referentes ao filtro F4 (posição P_4) são muito próximos àqueles valores apresentados na Figura 4.7. Nota-se que a intensidade da radiação de fundo representa algo em torno de 10 a 20% do sinal fotométrico de interesse. Inicialmente, uma inspeção visual da Figura 4.7 revela a inexistência de flutuações drásticas e, principalmente, em fase entre as

¹⁰O efeito das nuvens sobre a radiação varia em uma ampla faixa com o comprimento de onda da radiação. A água absorve em λ no infravermelho de maneira suficientemente intensa para tornar o espalhamento desprezível. Em λ no visível, ao contrário, pouca absorção é proporcionada pelas nuvens, e a radiação é intensamente espalhada.

duas séries temporais, $\text{OH}^*(9-4)$ e $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$. Em segundo lugar, o coeficiente de correlação cruzada entre o sinal fotométrico de emissão e o sinal da radiação de fundo correspondente é baixo ($< 0,5$). Desta maneira, acredita-se ser possível evitar a utilização de medidas de *nightglow* contaminadas pela presença das nuvens.

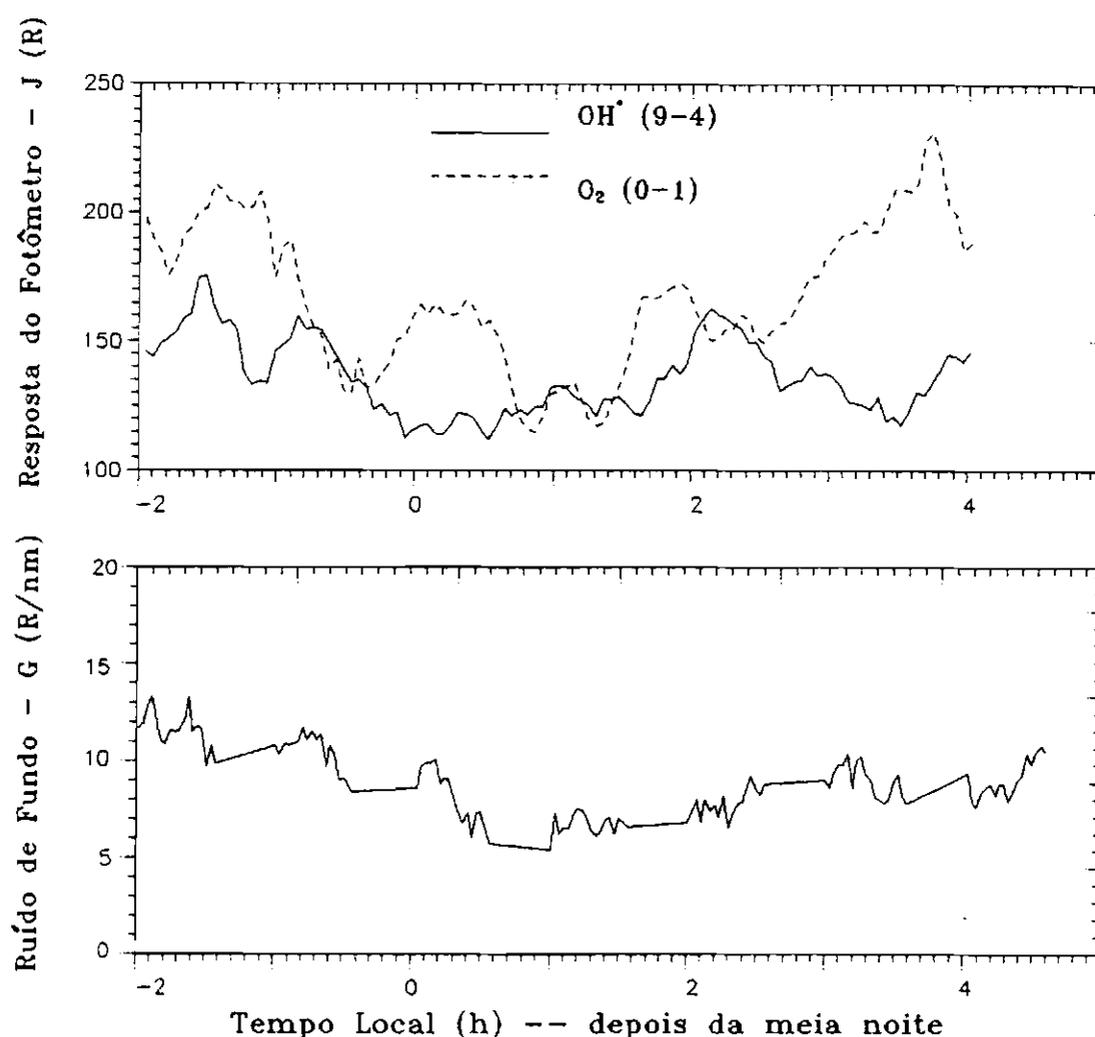


Fig. 4.7 - O comportamento de $G(\lambda)$ e da resposta fotométrica, J (em Rayleighs), dos filtros F4 e F5, referentes à noite de 21/22 de junho de 1990. Nota-se que a escala da radiação de fundo é um fator de $\frac{1}{5}$ da escala da resposta do fotômetro nas posições referidas.

A ocorrência de uma tênue radiação residual -- reação quimioluminescente do óxido nítrico e oxigênio atômico -- que domina o espectro contínuo do *nightglow*, principalmente no visível, destaca-se como uma importante componente adicionada ao sinal fotométrico de interesse. O experimento ETON (Greer *et al.* 1986) mediu *in loco* a taxa de emissão do contínuo em $\lambda 714$ e $\lambda 540$ nm, obtendo

2,5 e 4 R nm⁻¹, respectivamente. Desta forma, uma análise comparativa informa que esta contaminação espectral deve contribuir com ~ 2 a 5% da intensidade fotométrica das emissões medidas pelo MULTI2.

Uma componente adicional da luz branca contínua que deve ser subtraída das medidas de *nightglow* é devida à luz integrada estelar e à luz zodiacal. Estas fontes extraterrestres variam no espaço e tempo. Com o objetivo de minimizá-las, algumas providências foram tomadas. Via de regra, todas as observações são efetuadas em noites próximas à lua nova. O fotômetro foi inclinado em 25° S, apresentando, tal posição sobre a esfera celeste, um mínimo de influência da Via Láctea, *i.e.*, constante durante uma noite de observação. Todavia, se o espectro do céu noturno (na ausência da Lua) entre os respectivos comprimentos de onda $\lambda\lambda 771-778$ nm e $\lambda\lambda 864-868$ nm é uniformemente distribuído, então este tipo de contaminação não afetaria as medidas de temperatura e taxa de emissão, mas apenas aumentaria a parcela de subtração do ruído de fundo (G_{λ}).

4.5 - CONFIABILIDADE E PRECISÃO DAS MEDIDAS

A temperatura rotacional T , bem como a taxa de emissão B , são determinadas por equações (*e.g.*, as relações 4.28 e 4.31 para a banda (9-4) da hidroxila) que incluem vários fatores, entre os quais,

S_k (sensibilidade), $t_k = t_k(\lambda)$ (transmitância relativa), $(\Delta\lambda_{eff})_k$ (largura efetiva), como fatores experimentais:

$i = i(\lambda)$ (intensidade espectroscópica normalizada), como fator teórico;

J_k , que caracteriza os erros aleatórios associados a resposta do fotômetro.

Por conseqüência, o erro na estimativa de T e B resulta da propagação dos erros inerentes aos fatores mencionados acima.

4.5.1 - Erro Associado aos Fatores Experimentais

A determinação em laboratório da sensibilidade absoluta do fotômetro é uma experiência muito crítica, envolvendo várias grandezas físicas e geométricas, cujas incertezas nem sempre são bem conhecidas. Uma estimativa do erro sistemático de calibração da lâmpada padrão produz uma margem de erro não superior a 10% (Takahashi, 1981). No entanto, deve-se lembrar que a temperatura rota-

cional depende da razão entre as sensibilidades de duas diferentes posições, tal que a ocorrência de um pequeno erro sistemático na calibração do experimento diluir-se-ia no cálculo final da temperatura rotacional.

O erro na determinação da curva de transmitância relativa está diretamente relacionado ao grau de linearidade do registrador do monocromador utilizado (resolução de 0,1 nm) e à leitura do sistema posicionador dos filtros. Usando lâmpadas padrões de Ar, Ne, Kr e Hg determinou-se a diferença entre o comprimento de onda selecionado pela rede holográfica e o valor lido no registrador. Uma diferença média em torno de 0,2 nm foi obtida. Por outro lado, uma tolerância de $\pm 0,3^\circ$ da leitura de posição do filtro resultará num deslocamento de $t = t(\lambda)$ em $\pm 0,2$ nm. Em especial, no caso da emissão OH(9-4), este último efeito pode ser atenuado no cálculo da temperatura rotacional se uma operação de maximização da relação $\sum_{\alpha} i_{\alpha}(t_k)_{\alpha}$ é executada sobre um intervalo bem definido em comprimento de onda. Neste sentido, um ensaio numérico mostra que o deslocamento de $\pm 0,3$ nm na curva de transmitância relativa causará variações em T e B de, aproximadamente, $\pm 3,5\%$ e $\pm 6\%$, respectivamente.

O erro embutido no cálculo da largura efetiva do filtro de cada posição, $(\Delta\lambda_{\text{eff}})_k$, não dependerá do efeito de deslocamento da curva, mas, especialmente, das qualidades ópticas do filtro em utilização — o filtro não deve traspasar luz além dos limites espectrais estabelecidos pelo experimento. Se o fator $\Delta\lambda_{\text{eff}}$ do filtro em utilização apresentar uma mudança substancial ao longo do tempo, é necessário efetuar-se uma larga varredura espectral sobre o filtro, com o objetivo de detectar as possíveis regiões de vazamento de luz, e corrigir este efeito no cálculo da largura efetiva.

4.5.2 - Erro Associado aos Fatores Teóricos

Considerando a validade da distribuição de Boltzmann para calcular a temperatura rotacional (T), estes valores serão sensíveis aos parâmetros espectroscópicos usados no cálculo das intensidades normalizadas. Por exemplo, considerando a emissão OH(9-4), diferentes conjuntos de valores dos coeficientes de Einstein, A , conduzem a mudanças pouco significativas, de até 5%, nos cálculos de T (Turnbull e Lowe, 1989). A temperatura rotacional deduzida das intensidades espectroscópicas normalizadas depende dos valores relativos, e não absolutos de A .

4.5.3 - Erro nas Medidas de B e T

As equações (4.28) e (4.31) para a emissão $\text{OH}(9-4)$ e, (4.41) e (4.44) para a emissão $\text{O}_2(0-1)$, são usadas para avaliar o efeito da propagação dos erros sistemáticos associados a cada fator mencionado nos parágrafos anteriores. Assim, Os erros estimados nos valores absolutos das taxas de emissão de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $\text{OH}^*(9-4)$ são da ordem de 20% e, das temperaturas rotacionais, 12% e 8%, respectivamente.

4.5.4 - Erro no Cálculo de η

O cálculo do parâmetro η envolve o quociente entre as frações relativas da taxa de emissão e temperatura. Conseqüentemente, o erro na determinação de η não dependerá dos erros sistemáticos inerentes aos valores absolutos das medidas de B e T , sobre um período de observação. Uma análise estatística para estimar σ_η é fornecida no Capítulo 6.

CAPÍTULO 5

DADOS DO MULTI2 PARTE I: TAXAS DE EMISSÃO E TEMPERATURAS

Observações simultâneas das emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$ têm sido efetuadas em Cachoeira Paulista (22.7° S, 45.0° W) desde fevereiro de 1983. O MULTI2 (abreviação sugerida por Hisao Takahashi para designar este experimento, constituído de cinco filtros de interferência inclináveis) começou a operar em Janeiro de 1987 e, desde então, tem produzido uma longa série de boas observações, em condições propícias de céu claro e períodos de lua nova. A conversão dos dados do MULTI2 para algumas destas noites, em termos da taxa de emissão aparente e temperatura rotacional das respectivas emissões, é apresentada.

5.1 - COLETA DE DADOS: PRELIMINARES

No período de outubro de 1989 a novembro de 1991, um total de 68 séries de medidas de *airglow* foram tomadas. Destacam-se, entre elas, 29 noites em que registram-se medidas ininterruptas por mais de 4 horas, não revelando, portanto, uma contaminação espectral expressiva, sobretudo pelas nuvens. Assim, as medidas contaminadas pelas nuvens foram descartadas neste trabalho. Este monitoramento inicial é indicado pelo comportamento do sinal de $G_\lambda(\lambda)$ para a emissão $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, conforme explicado anteriormente.

A presente análise restringe as medidas àquelas tomadas próximo à meia-noite (horário local), com a finalidade de permitir uma estabilização dos mecanismos de produção e perda dos constituintes atmosféricos minoritários, evidenciando os aspectos dinâmicos da mesopausa. As medidas tomadas depois das 5 horas (horário local) não foram usadas nesta análise, visto que elas freqüentemente contêm uma porção do espectro de *twilight glow*. Entretanto, a informação que elas reservam pode ser analisada no futuro.

Uma seqüência com os cinco filtros mais o obturador leva aproximadamente 3.3 min. Conseqüentemente, a cada intervalo médio de 3.3 min obtém-se uma

medida para a taxa de emissão e temperatura. Eventualmente, encontram-se valores espúrios nas séries temporais — flutuações bruscas nas intensidades das emissões. Para corrigir este problema utilizou-se, com algum critério¹¹, um polinômio de ajuste aos dados, não necessariamente igualmente espaçados entre si, para interpolar e achar o valor da medida correspondente ao valor de tempo (Bevington, 1969).

Com objetivo de conter as oscilações de altas frequências nos dados, um procedimento de suavização do tipo média móvel para regressão polinomial de mínimos quadrados foi empreendido. O filtro designado para remover os sinais randômicos, neste caso, produz estimativas no passado (em $t - \Delta|_t$, onde Δ é o intervalo de tempo fixo) da série temporal. O método assume que todas as medidas apresentem o mesmo grau de acurácia. O comprimento do intervalo médio escolhido foi de 20 min e o grau do polinômio de 2. Os efeitos de borda são tratados através de estimadores polinomiais especiais. Os detalhes do método podem ser encontrados em Brandt (1970), páginas 291-305.

5.2 - RESULTADOS I: TAXAS DE EMISSÃO E TEMPERATURAS

As taxas de emissão (B) e as temperaturas rotacionais medidas (T_m) para o $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$ nas 29 noites observadas foram calculadas pelos métodos desenvolvidos nos Capítulos 3 e 4, e tratadas adequadamente através dos algoritmos de interpolação e suavização anteriormente mencionados. A Tabela 5.1 indica os valores médios dessas quantidades para cada noite analisada.

Se as variações da taxa de emissão e temperatura possuem o mesmo padrão, então uma estimativa da coerência temporal entre estas quantidades pode ser calculada usando os coeficientes de correlação cruzada, $r(\tau)$, definidos por:

$$r(\tau) = \frac{\sum_t [B(t+\tau) - \bar{B}] [T_m(t) - \bar{T}_m]}{\left\{ \sum_t [B(t+\tau) - \bar{B}]^2 [T_m(t) - \bar{T}_m]^2 \right\}^{1/2}}, \quad (5.1)$$

onde $B(t)$ e $T_m(t)$ representam os valores da taxa de emissão e temperatura, registradas no tempo t , respectivamente; \bar{B} e \bar{T}_m são os valores médios noturnos destas quantidades; e τ é a defasagem temporal. O valor máximo de $r(\tau)$ indicará a defasagem temporal entre a taxa de emissão e temperatura rotacional medida.

¹¹Press e Teukolsky (1977) mostraram que o algoritmo da FFT (transformada rápida de Fourier) concede igualmente o mesmo peso dos dados reais aos interpolados, originando frequências artificiais.

TABELA 5.1 - TAXAS DE EMISSÃO E TEMPERATURAS DE $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ E $OH^*(9-4)$ MEDIDAS PELO MULTI2.

Data	Emissão: $OH^*(9-4)$		Emissão: $O_2(b^1\Sigma_g^+)$		A_p (3 dias antes da data central)
	\bar{B} (R)	\bar{T}_m (K)	\bar{B} (R)	\bar{T}_m (K)	
2/3 outubro 1989	335	204	559	173	8, 12, 13, 9
25/26 outubro 1989	333	194	499	171	51, 22, 17, 23
2/3 novembro 1989	401	197	459	169	23, 14, 8, 21
26/27 novembro 1989	642	209	597	163	6, 8, 2, 11
27/28 janeiro 1990	464	201	389	164	32, 19, 10, 4
29/30 janeiro 1990	448	209	555	172	10, 4, 7, 24
22/23 abril 1990	355	209	729	186	9, 18, 13, 16
23/24 abril 1990	395	210	724	178	18, 13, 16, 37
24/25 abril 1990	473	210	779	176	13, 16, 37, 30
25/26 abril 1990	440	204	648	174	16, 37, 30, 19
26/27 abril 1990	415	202	638	177	37, 30, 19, 16
23/24 maio 1990	443	204	614	169	20, 22, 32, 11
26/27 maio 1990	588	202	611	163	11, 8, 20, 47
21/22 junho 1990	764	196	607	161	10, 6, 2, 5
22/23 junho 1990	595	197	473	167	6, 2, 5, 6
23/24 junho 1990	573	198	397	158	2, 5, 6, 7
24/25 junho 1990	509	196	538	163	5, 6, 7, 8
26/27 agosto 1990	434	204	567	167	77, 24, 6, 63
16/17 setembro 1990	609	198	536	162	19, 19, 22, 23
18/19 setembro 1990	718	203	534	159	22, 23, 12, 19
14/15 novembro 1990	588	195	549	166	12, 5, 3, 1
20/21 novembro 1990	619	203	958	176	16, 15, 10, 7
21/22 novembro 1990	663	205	899	170	15, 10, 7, 10
11/12 abril 1991	433	200	624	173	6, 10, 8, 5
17/18 abril 1991	489	207	718	176	6, 6, 5, 13
16/17 junho 1991	468	199	457	162	120, 8, 13, 5
17/18 junho 1991	433	200	560	172	8, 13, 5, 67
7/8 julho 1991	496	196	447	165	13, 4, 8, 7
3/4 setembro 1991	522	208	716	169	52, 47, 28, 16

Os resultados para a emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ estão sintetizados nos parágrafos seguintes:

- O valor médio noturno da temperatura rotacional varia de 158 K a 186 K e o valor médio noturno da taxa de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ varia de 389 R a 958 R. A taxa de emissão pode mudar rapidamente entre noites sucessivas, enquanto que a temperatura medida mantém-se mais estável. Nota-se, por exemplo, que na noite de 23/24 de Junho de 1990 o valor médio da taxa de emissão foi de 397 R e 158 K para a temperatura; na noite seguinte, estes valores foram 538 R e 163 K. A taxa de emissão cresceu de 36%, enquanto que a temperatura aumentou apenas 3%. A Figura 5.1 mostra as temperaturas médias e as taxas de emissão médias entre 23,5 horas e 5 horas (tempo local) para cada noite. Nota-se que, em geral, uma temperatura rotacional elevada corresponde a uma taxa de emissão também elevada. Usando os valores da Figura 5.1, a Figura 5.2 mostra que existe uma correspondência entre temperatura rotacional e taxa de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$:

$$T_m = 151 + 0,029 B. \quad (5.2)$$

Esta equação indica que se a temperatura é acrescida de 1 K, então a taxa de emissão aumentará em 35 R. É prematuro concluir que de fato existe uma correlação linear entre estas duas variáveis. Neste caso, uma quantidade muito maior de amostras seria necessário para chegar-se a uma conclusão estatística fidedigna. O trabalho recente de Clemesha *et al.* (1991) analisa um conjunto muito mais significativo de amostras (médias noturnas), e conclui que a taxa de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ possui boa covariância com a temperatura rotacional, embora não tenha logrado êxito para concluir a respeito do mecanismo físico principal que explique estas variações correlacionadas.

- A Tabela 5.1 mostra também os valores do índice magnético A_p — indicador da atividade auroral na região polar — na data de observação (em negrito) e para 3 dias anteriores a esta data. O *nightglow* de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ pode ser relacionado à atividade geomagnética global (Wiens *et al.* 1991). Neste trabalho, porém, os valores de A_p foram apresentados apenas como valores de referência às condições geofísicas da atmosfera superior nos dias de observação.
- De um total de 29 noites convertidas em taxa de emissão e temperatura rotacional da emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, somente 9 noites possuem um padrão ondulatório bem definido. Os resultados são mostrados nas Figuras 5.3 - 5.11, para as respectivas noites de 23/24 de abril, 25/26 de abril, 23/24 de

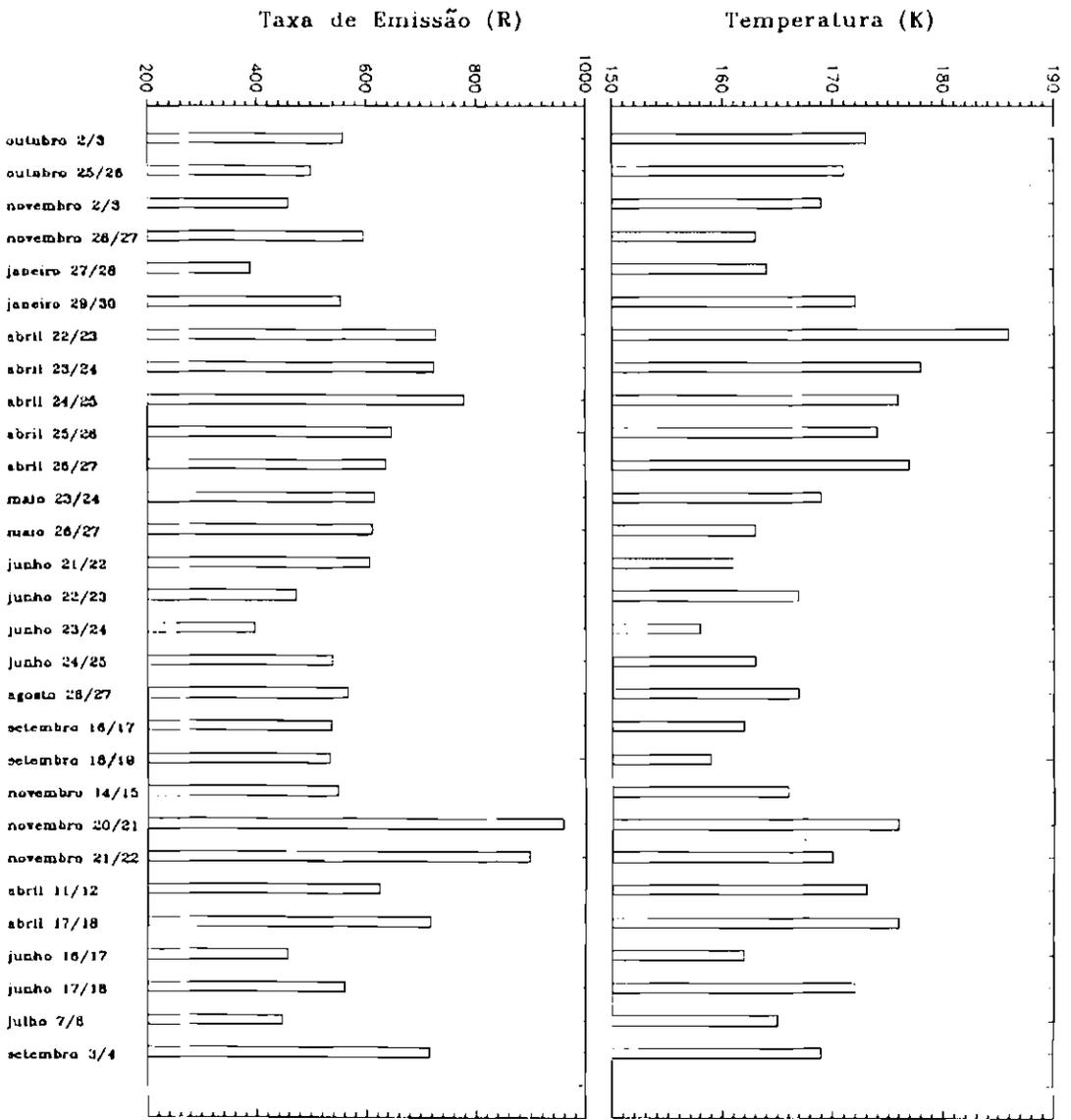


Fig. 5.1 - Taxas de emissão médias e temperaturas médias da emissão de O_2 ($\sum_{i=1}^n \Delta_i$, 0 - 1) durante o período de observação; obtidas para alguns dias entre outubro de 1989 a setembro de 1991.

maio, 26/27 de maio, 21/22 de junho, 24/25 de junho, 16/17 de setembro, 14/15 de novembro e 21/22 de novembro, todas de 1990. As barras de erro destas figuras referem-se ao erro aleatório inerente às medidas de B e T_m . O critério de seleção adotado baseou-se na análise da coincidência espectral entre as duas séries temporais, $B(t)$ e $T_m(t)$, conforme detalhar-se-á no capítulo seguinte.

- A defasagem temporal tem sido calculada para cada noite selecionada. Em geral a defasagem encontrada foi próxima de zero, sugerindo que as flutuações da temperatura rotacional e taxa de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ têm a mesma fase.

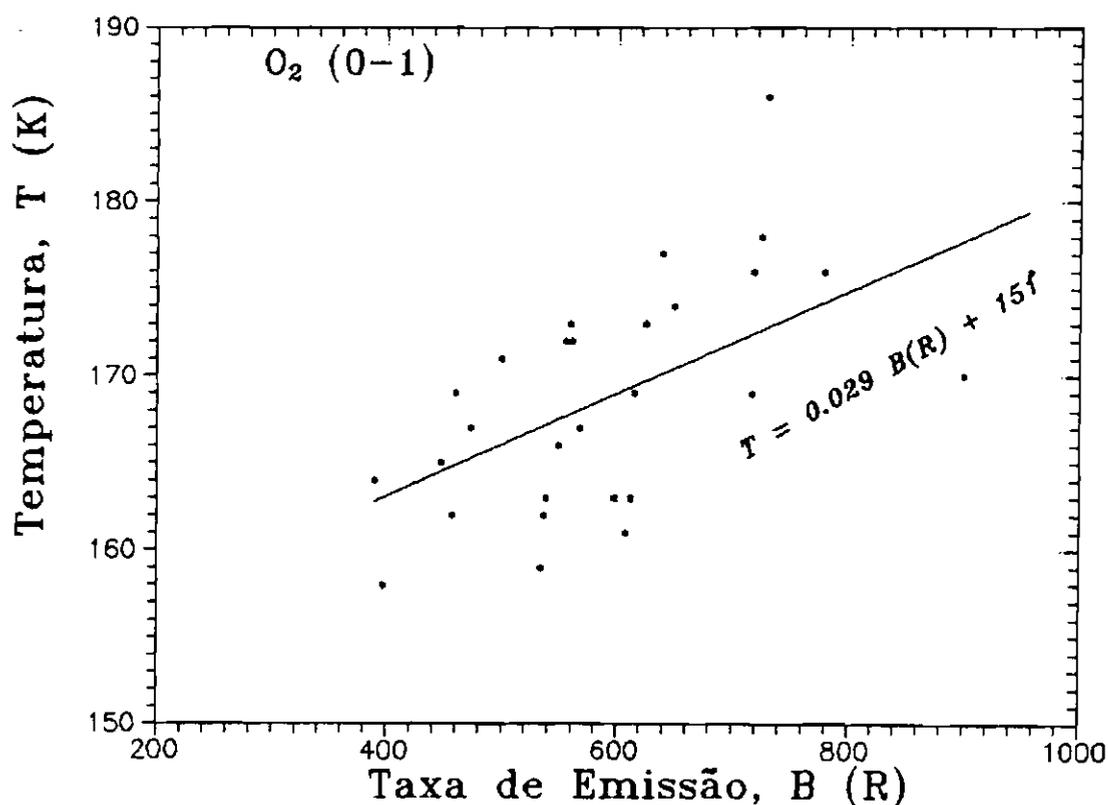


Fig. 5.2 - A temperatura rotacional média em função da taxa de emissão média de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$. A linha sólida representa a equação de regressão linear entre as duas variáveis. A variância estimada σ é de 0,60.

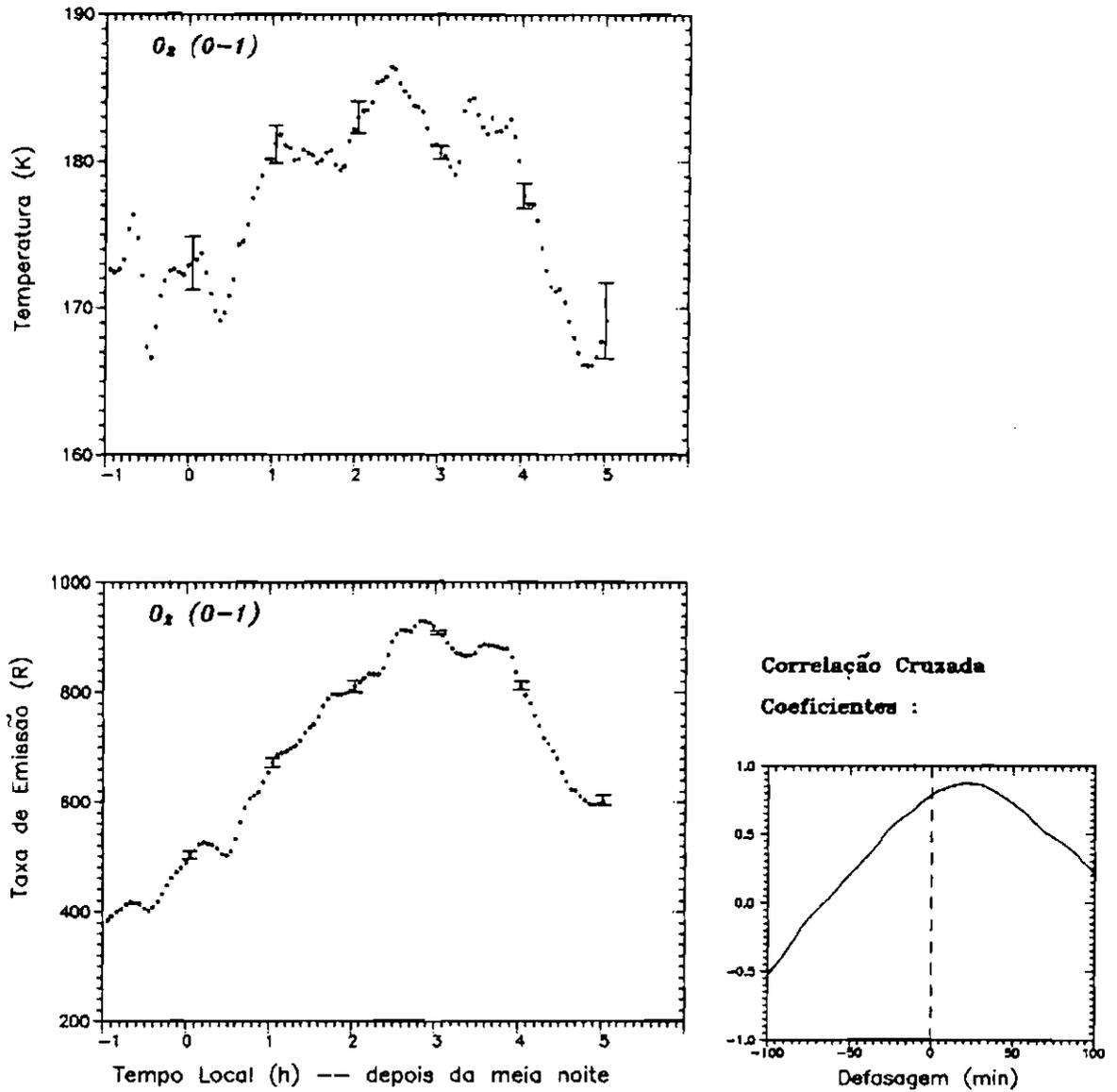


Fig. 5.3 - Os dados do MULTIF convertidos em temperaturas rotacionais e taxas de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e os coeficientes de correlação cruzada entre estas duas variáveis, referentes ao *nightglow* de 23/24 de abril de 1990. As barras de erro referem-se ao erro aleatório das medidas.

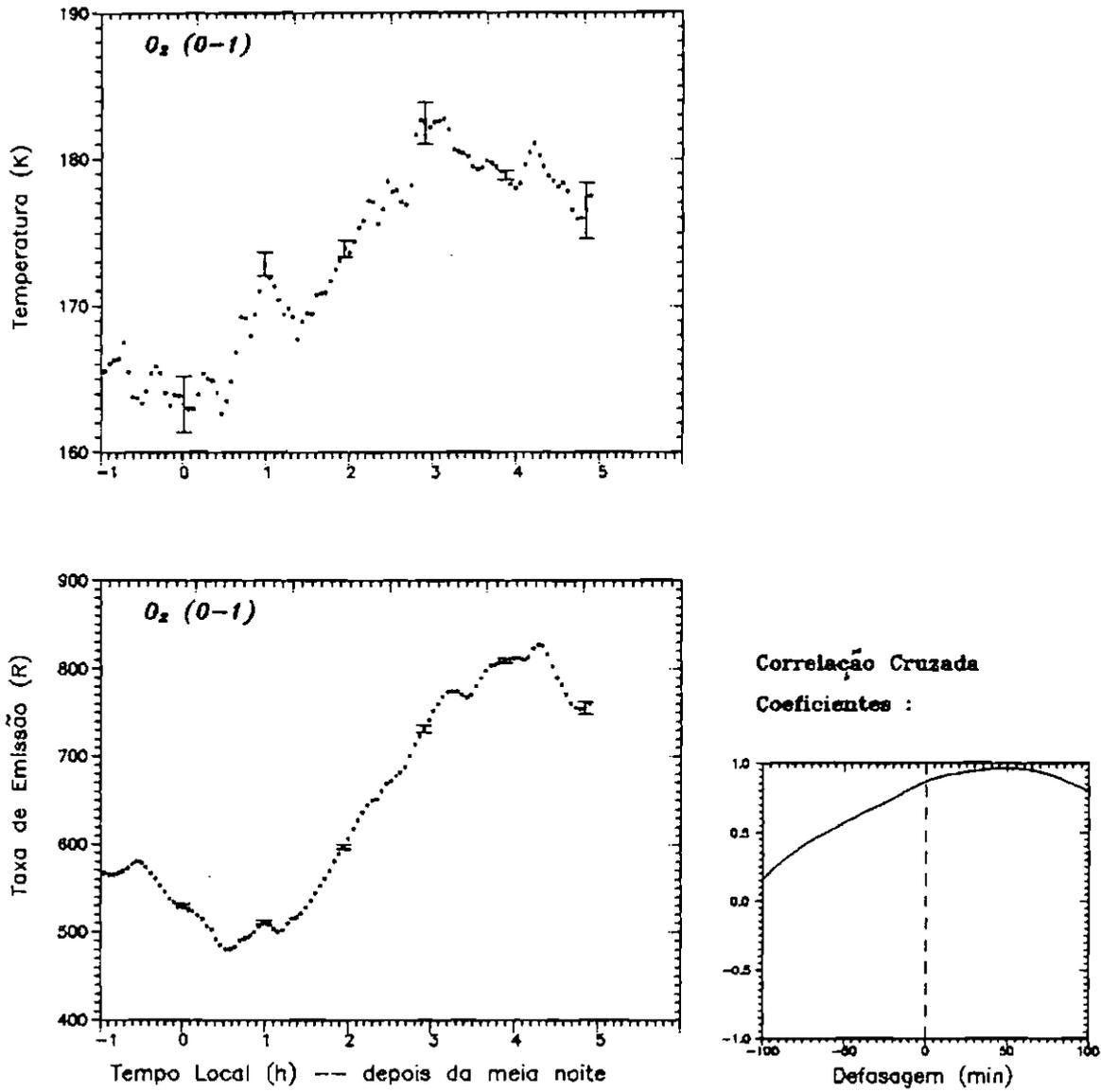


Fig. 5.4 - Idem à Figura 5.3, para o *nightglow* de 25/26 de abril de 1990.

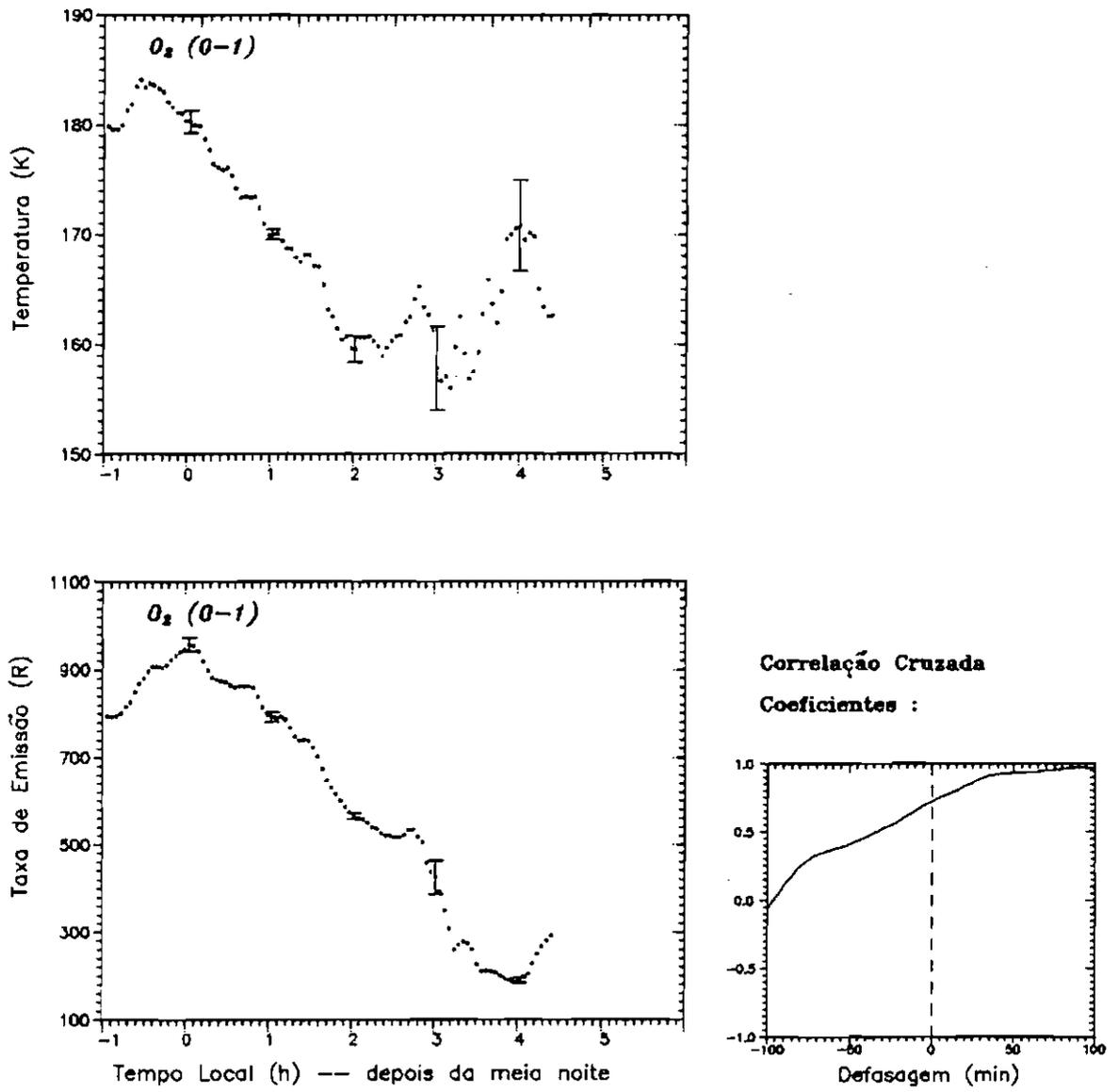
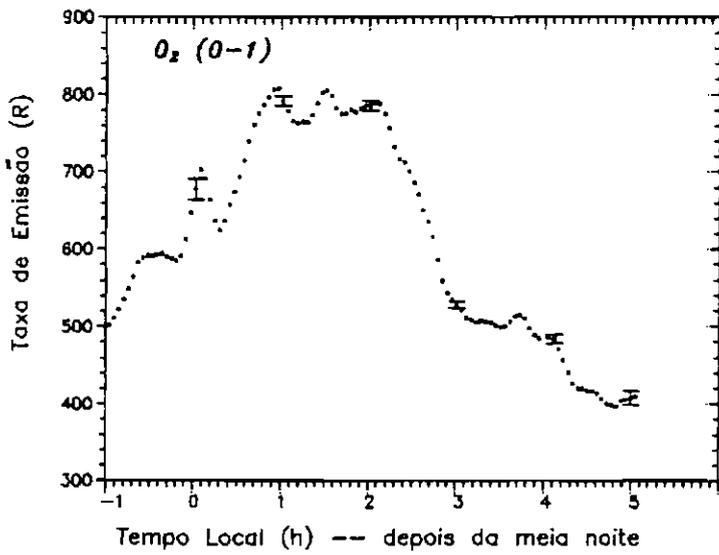
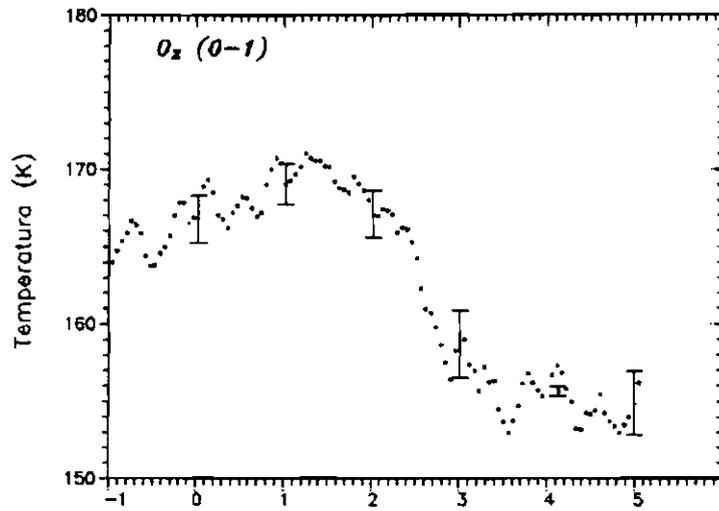


Fig. 5.5 - Idem à Figura 5.3, para o *nightglow* de 23/24 de maio de 1990.



Correlação Cruzada
Coeficientes :

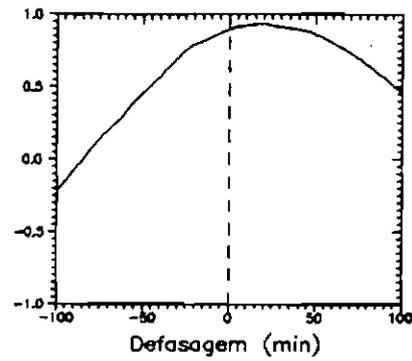


Fig. 5.6 - Idem à Figura 5.3, para o *nightglow* de 26/27 de maio de 1990.

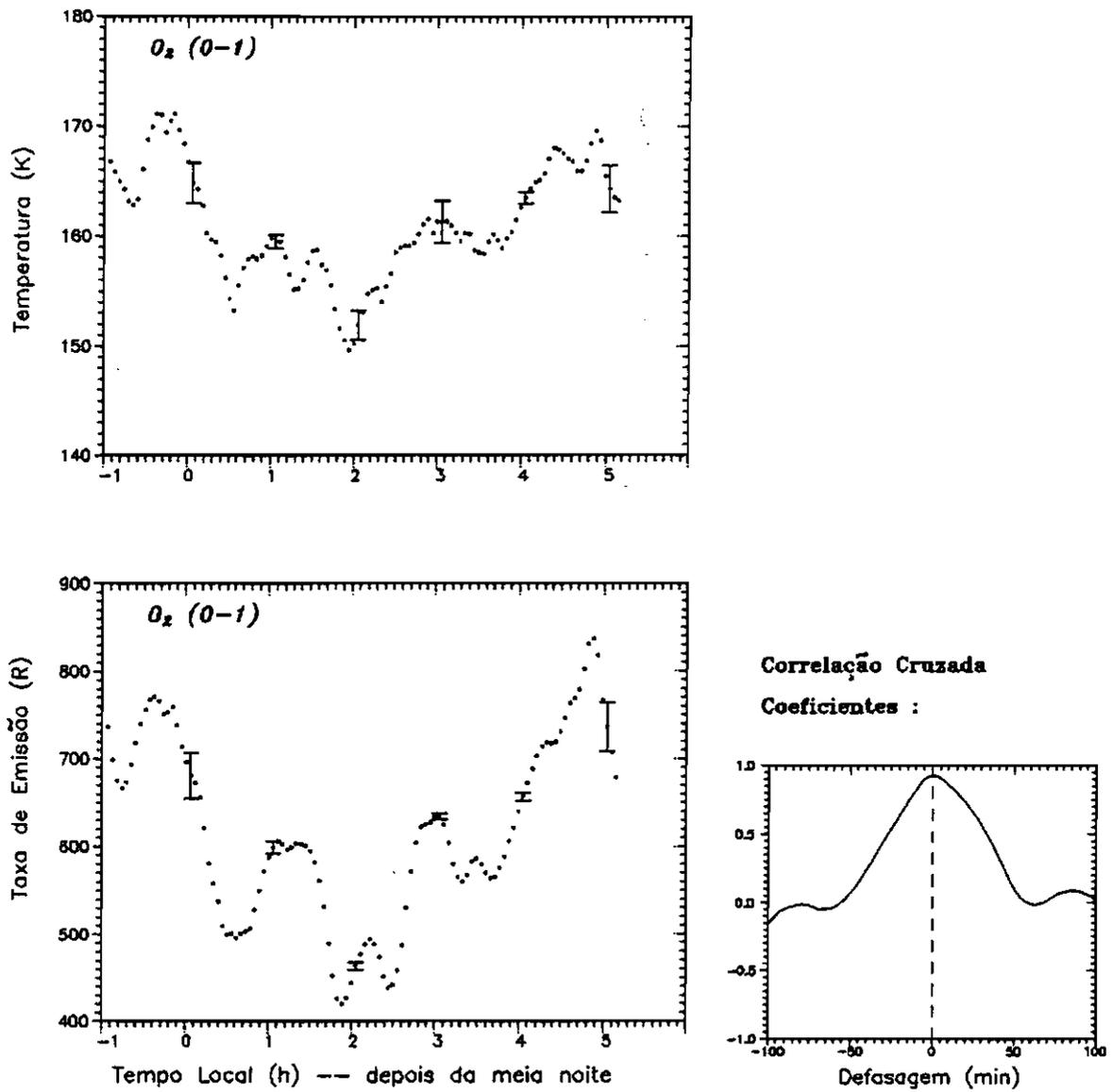


Fig. 5.7 - Idem à Figura 5.3, para o *nightglow* de 21/22 de junho de 1990.

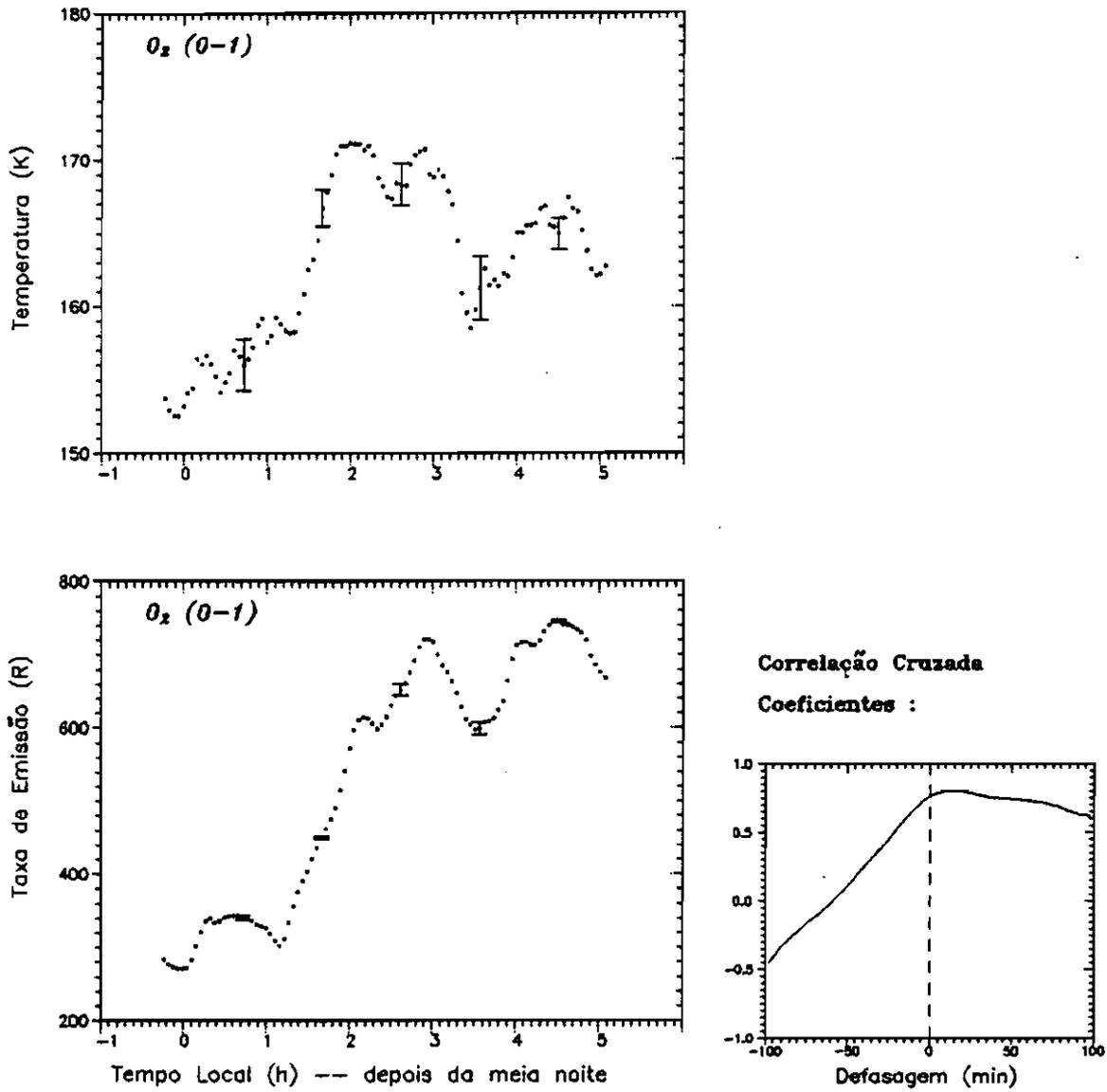


Fig. 5.8 - Idem à Figura 5.3, para o *nightglow* de 24/25 de junho de 1990.

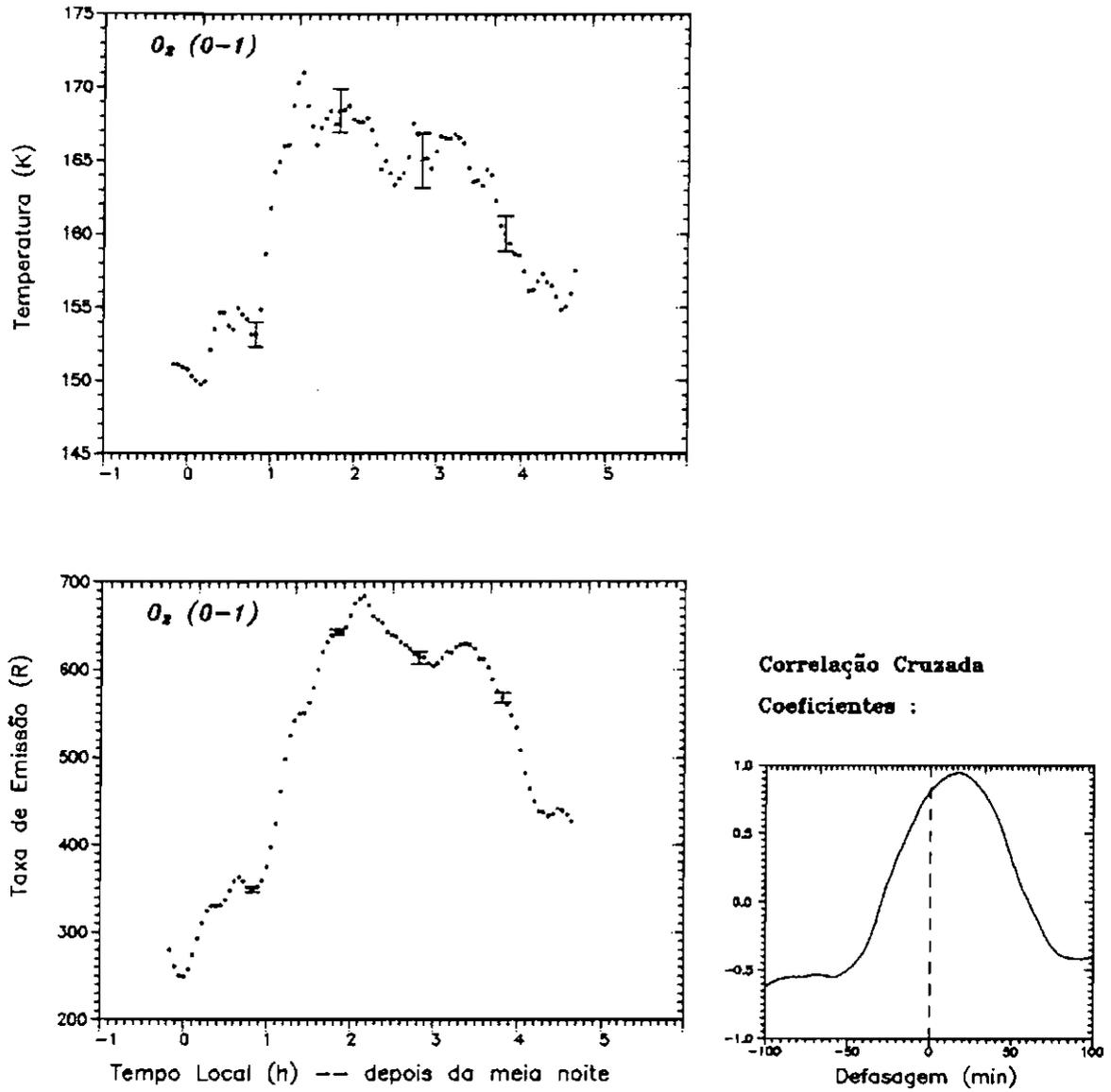


Fig. 5.9 - Idem à Figura 5.3, para o *nightglow* de 16/17 de setembro de 1990.

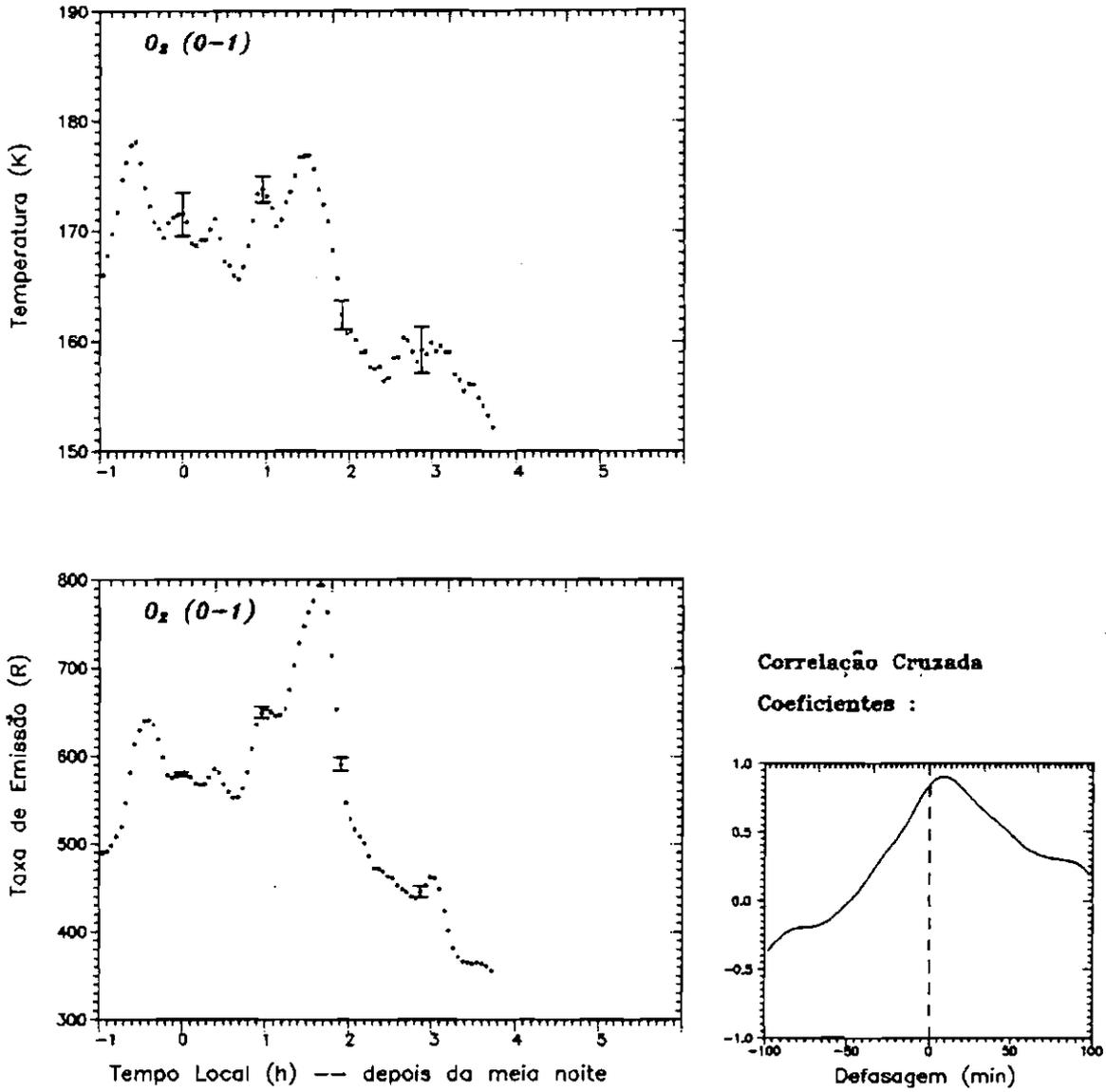


Fig. 5.10 - Idem à Figura 5.3, para o *nightglow* de 14/15 de novembro de 1990.

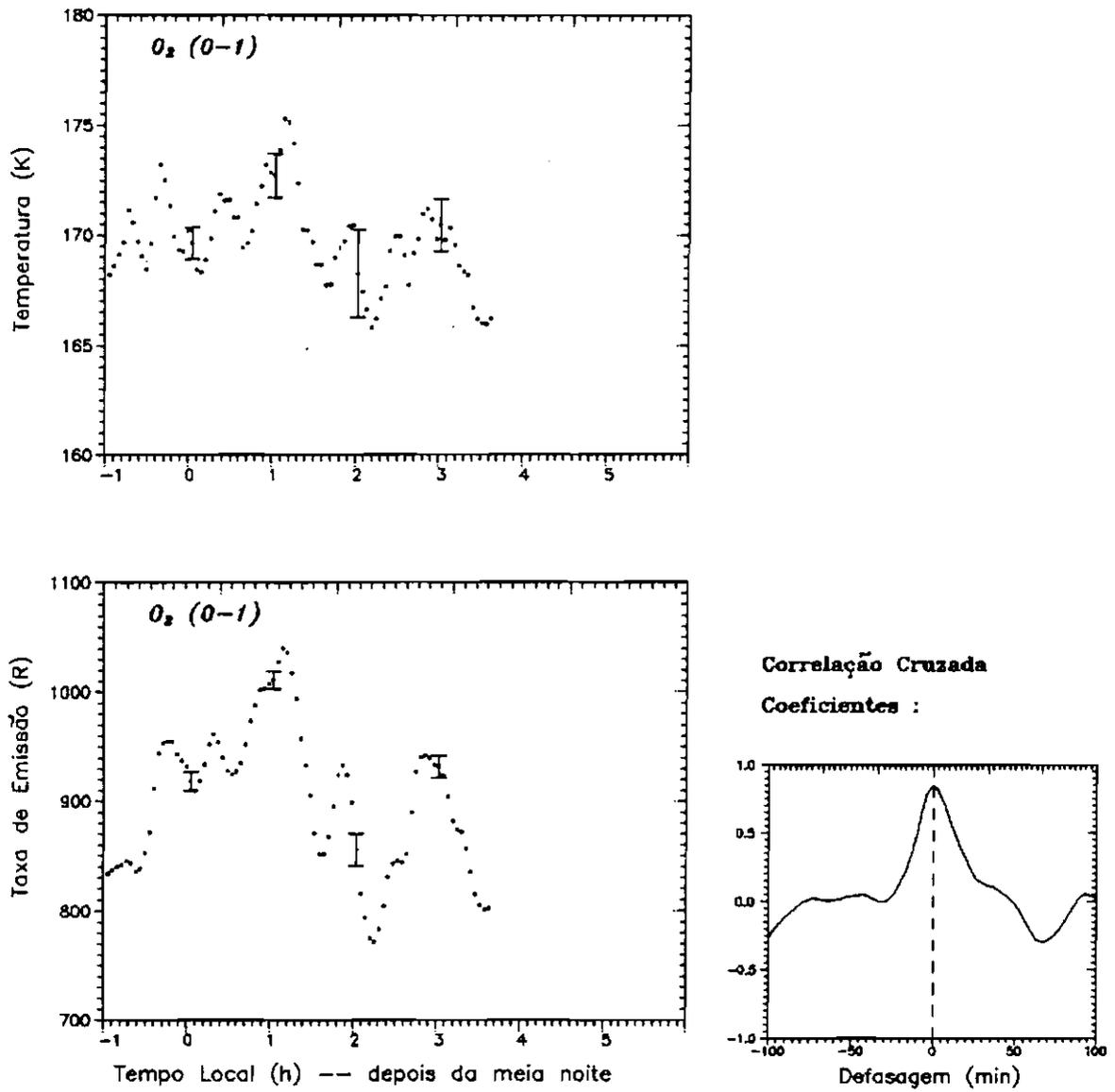


Fig. 5.11 - Idem à Figura 5.3, para o *nightglow* de 21/22 de novembro de 1990.

Alguns resultados referentes à emissão de $\text{OH}^*(9-4)$ encontram-se resumidos logo abaixo:

- O valor médio noturno da temperatura rotacional medida varia de 194 K a 210 K e o valor médio noturno da taxa de emissão de $\text{OH}^*(9-4)$ varia de 333 R a 764 R, conforme indica a Figura 5.12. Uma correlação linear entre os valores médios noturnos da temperatura rotacional e taxa de emissão, conforme é mostrado na Figura 5.13, produz uma variância baixa ($< 0,1$). No caso da emissão de $\text{OH}^*(9-4)$, para qualquer tentativa de covariância entre as variações diárias de B e T_m , deveria ter sido efetuada, inicialmente, a remoção das tendências de longo termo — as componentes anuais e semi- anuais —, visto que elas são significativas para esta emissão (Clemesha *et al.*, 1990). Tendo em vista o número reduzido de amostras usados nesta análise, não foi possível eliminar tais tendências de maneira estatisticamente confiável. O trabalho de Clemesha *et al.* (1991), citado anteriormente, analisa criteriosamente a covariância entre as variações de B e T_m para esta emissão, e conclui que a taxa de emissão de $\text{OH}^*(9-4)$ possui boa correlação com a temperatura rotacional.
- De um total de 29 noites convertidas em taxa de emissão e temperatura rotacional da emissão de $\text{OH}^*(9-4)$, somente 5 noites possuem um padrão ondulatório bem definido. Os resultados são mostrados nas Figuras 5.14 – 5.18, para as respectivas noites de 29/30 de janeiro, 21/22 de junho, 23/24 de junho, 20/21 de novembro, todas de 1990, e 17/18 de abril de 1991. As barras de erro destas figuras referem-se ao erro aleatório inerente às medidas de B e T_m . O critério de seleção adotado baseou-se na análise da coincidência espectral entre as duas séries temporais, $B(t)$ e $T_m(t)$, conforme detalhar-se-á no capítulo seguinte.
- A correlação cruzada entre temperatura e taxa de emissão tem sido calculada para cada noite selecionada. Em geral a defasagem temporal encontrada foi diferente de zero, sugerindo que as flutuações da temperatura rotacional e taxa de emissão de $\text{OH}^*(9-4)$ podem estar defasadas entre si.

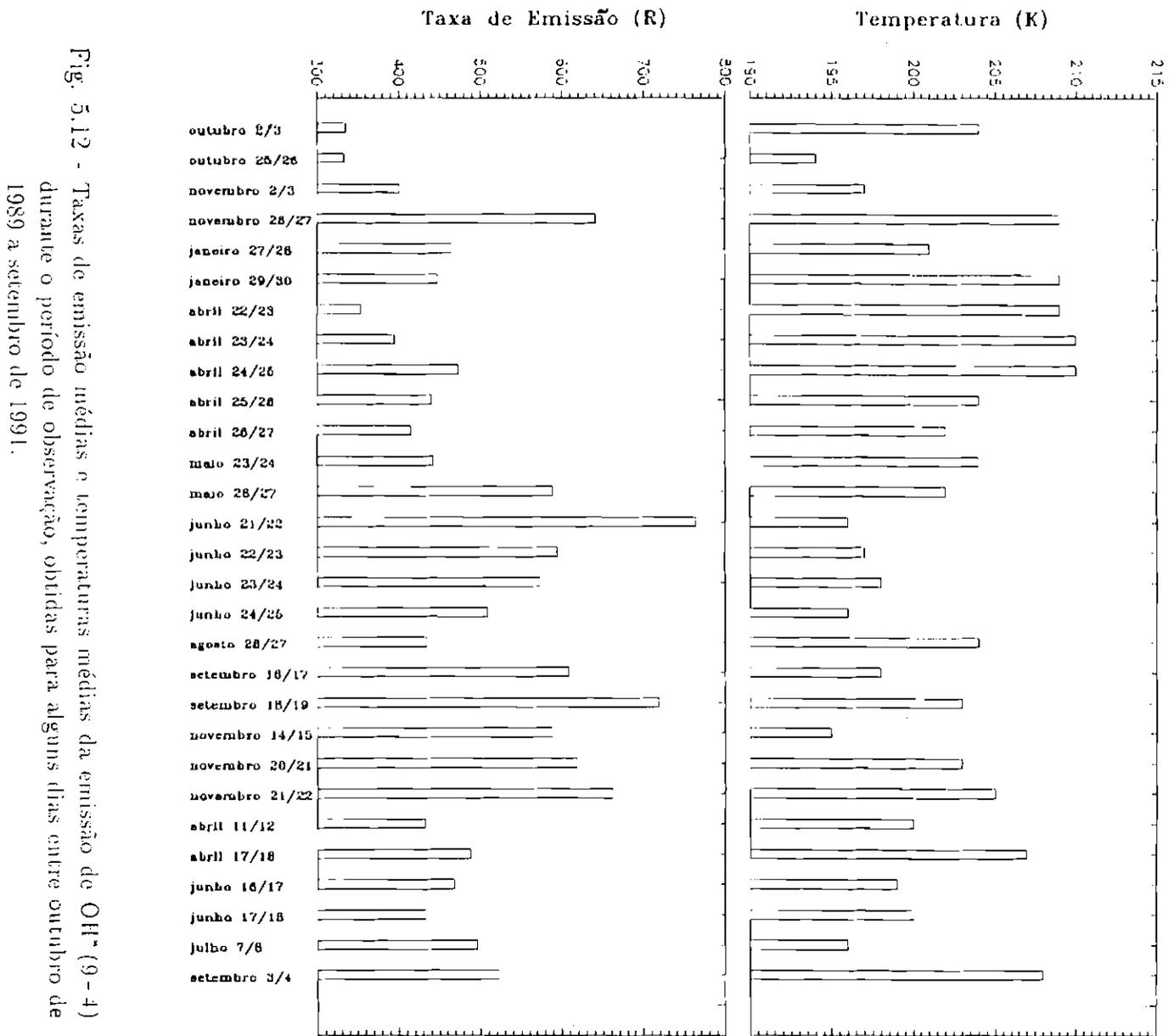


Fig. 5.12 - Taxas de emissão médias e temperaturas médias da emissão de OH* (9-4) durante o período de observação, obtidas para alguns dias entre outubro de 1989 a setembro de 1991.

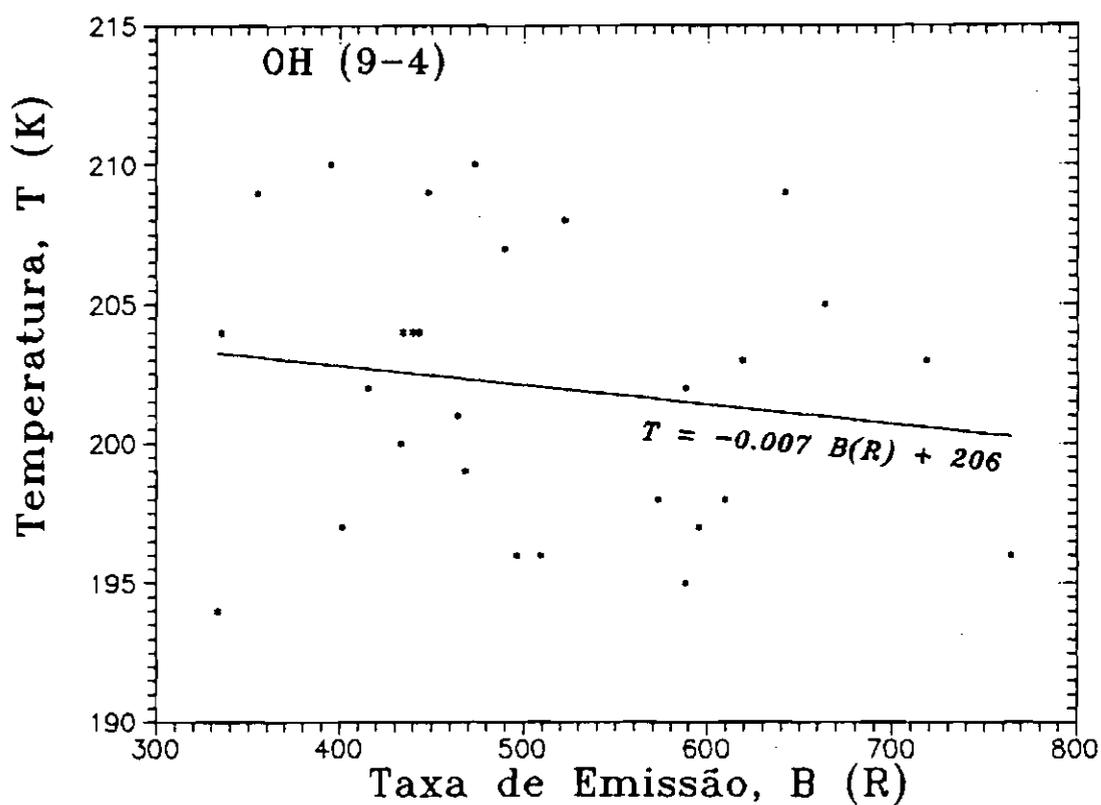


Fig. 5.13 - A temperatura média em função da taxa de emissão média de OH⁺ (9-4). A linha sólida representa a equação de regressão linear entre as duas variáveis. A variância estimada σ é de 0.09.

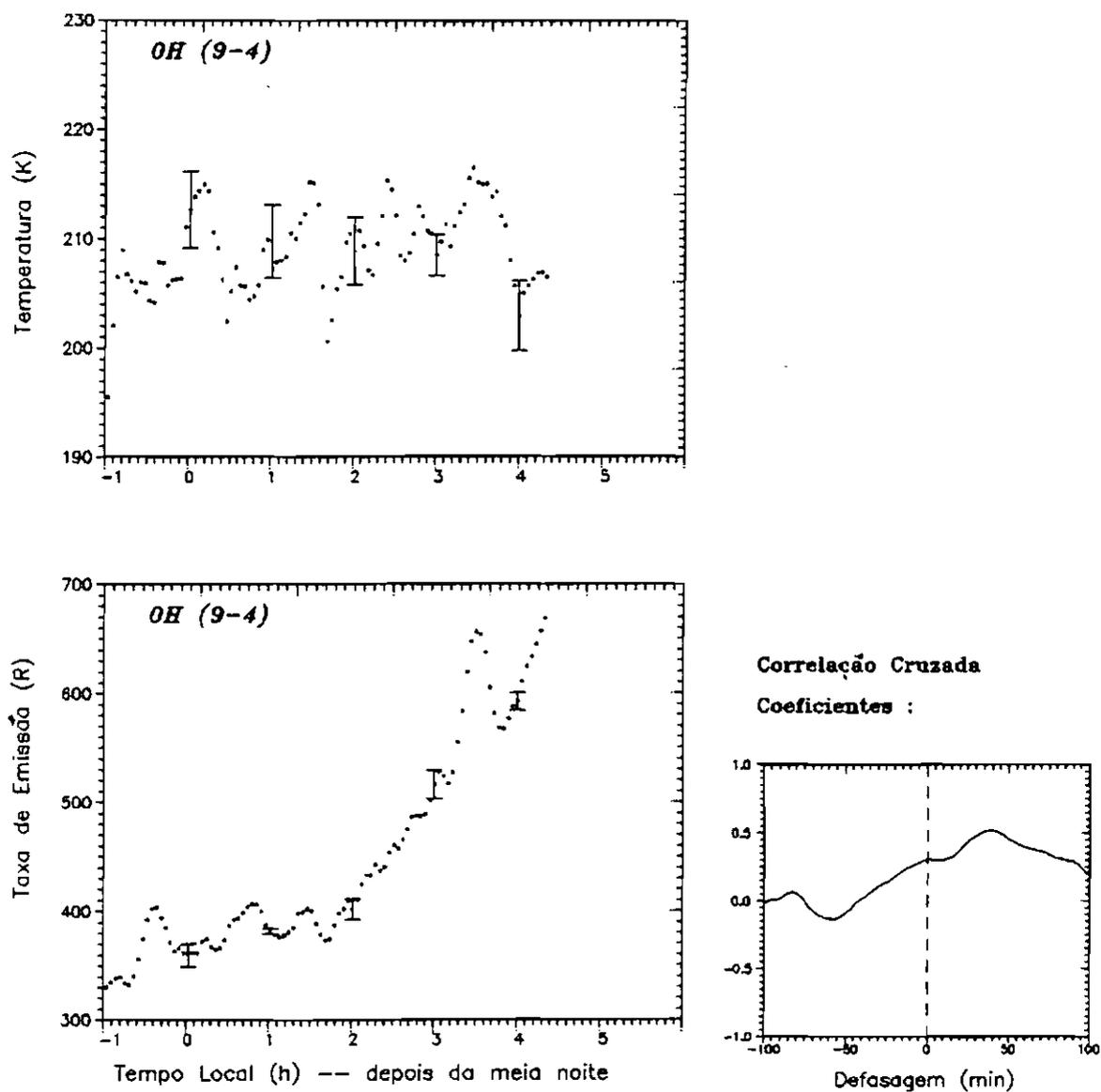
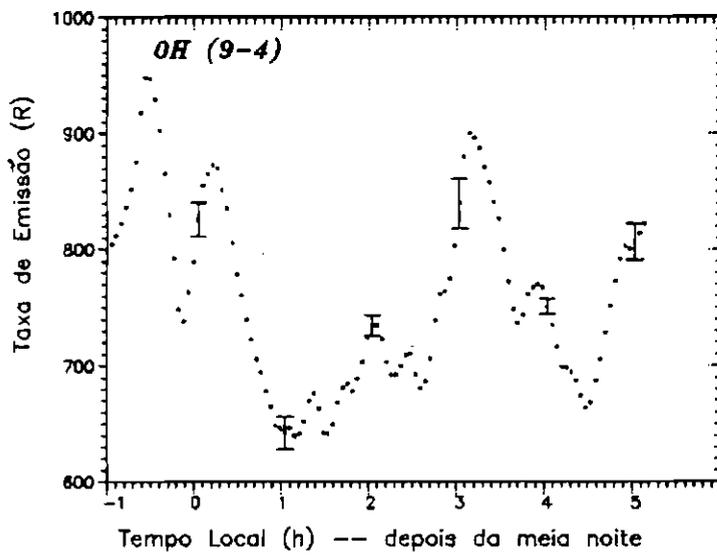
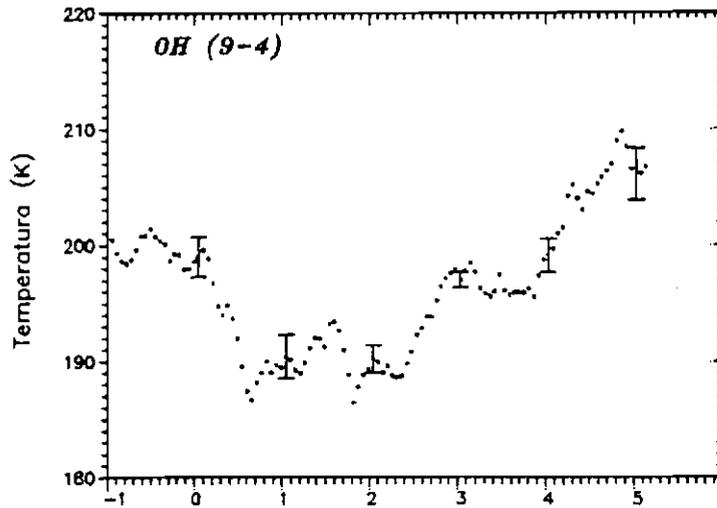


Fig. 5.14 - Os dados do MULT12 convertidos para as temperaturas rotacionais e taxas de emissão de $OH^*(9-4)$, e os coeficientes de correlação cruzada entre estas duas variáveis, referentes ao *nightglow* de 29/30 de janeiro de 1990. As barras de erro referem-se ao erro aleatório das medidas.



Correlação Cruzada
Coeficientes :

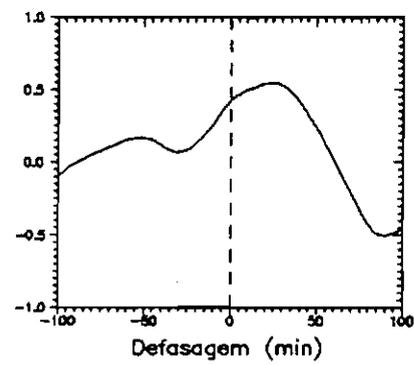


Fig. 5.15 - Idem à Figura 5.14, para o *nightglow* de 21/22 de junho de 1990.

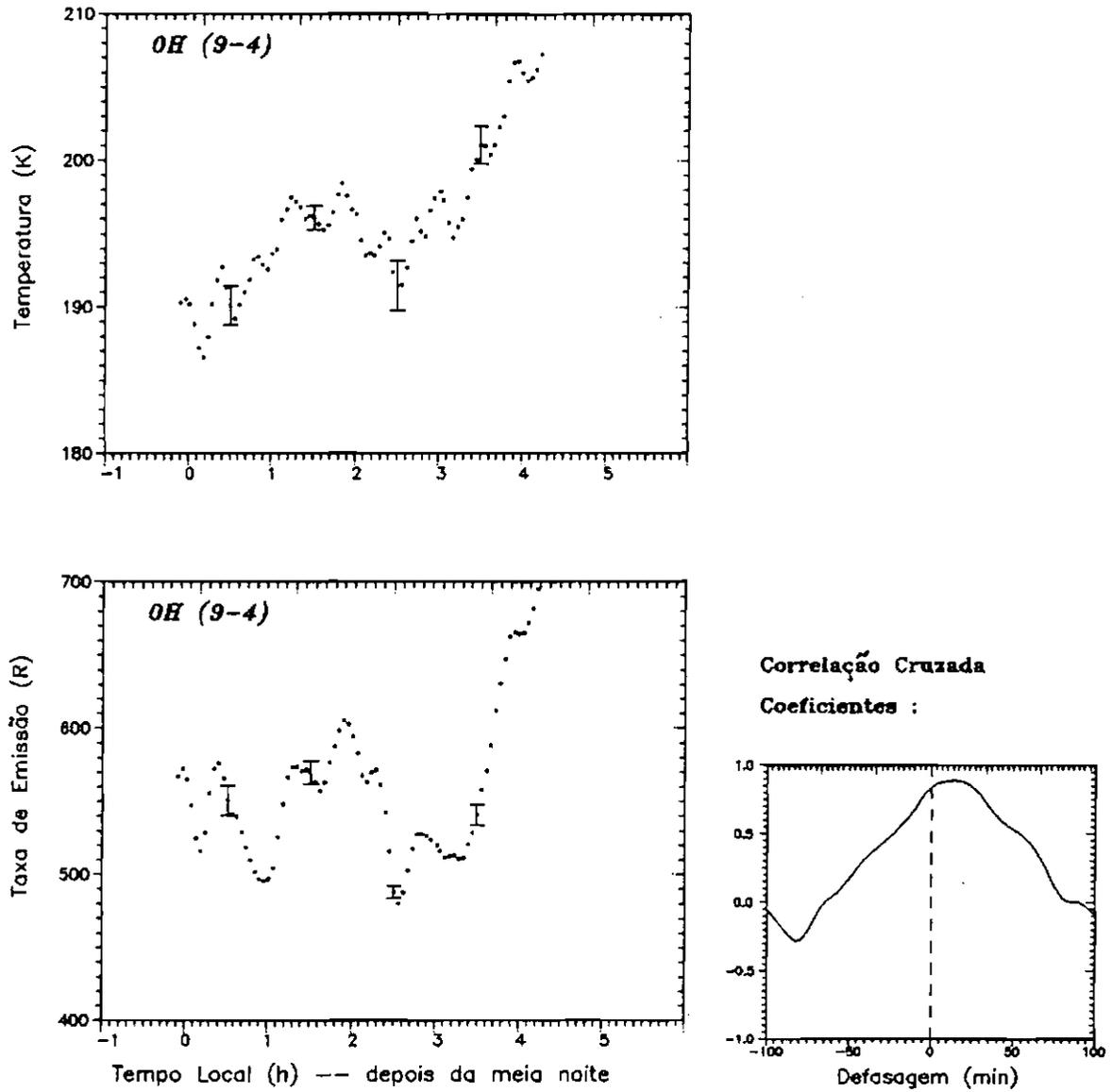


Fig. 5.16 - Idem à Figura 5.14, para o *nightglow* de 23/24 de junho de 1990.

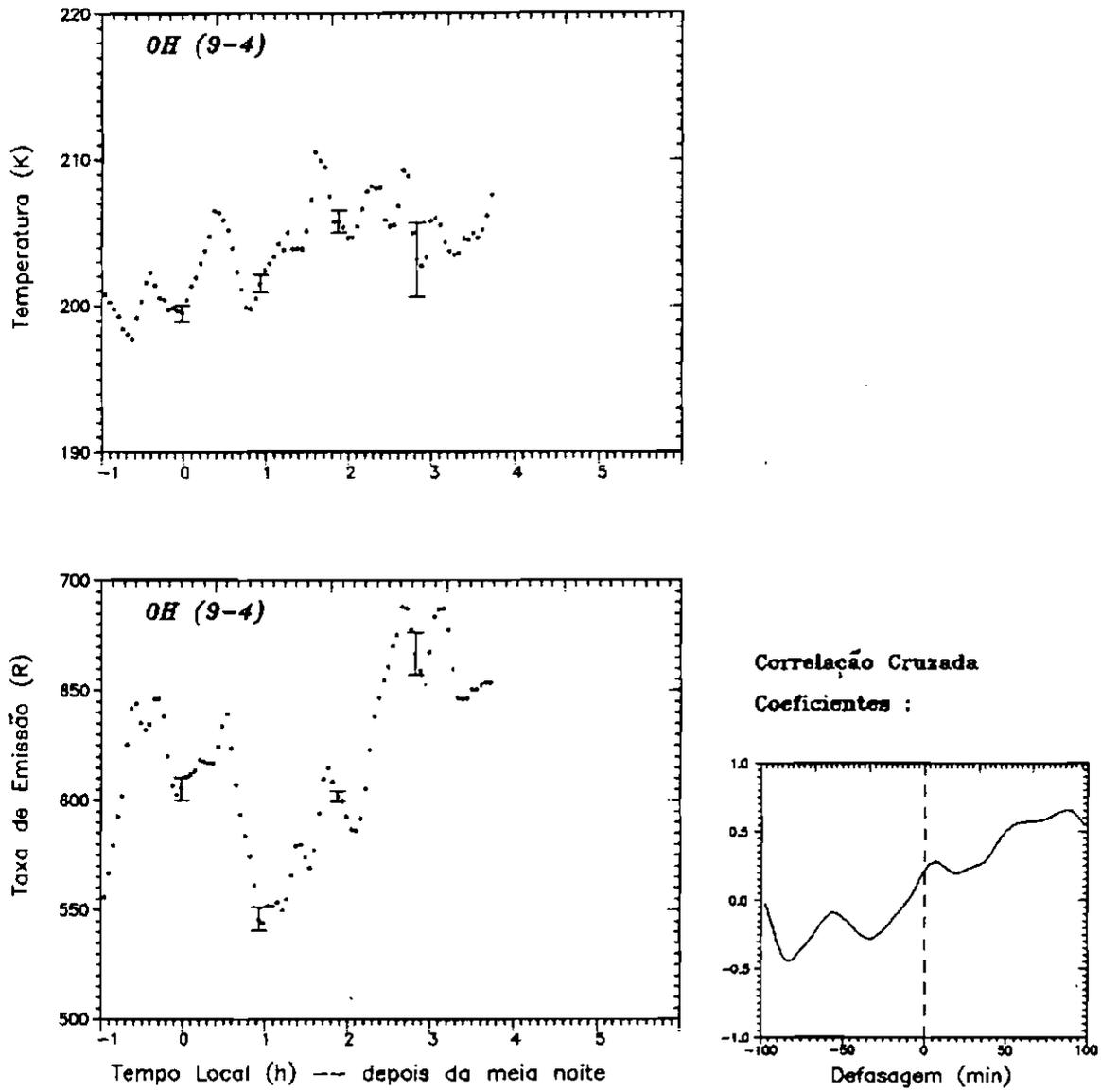


Fig. 5.17 - Idem à Figura 5.14, para o *nightglow* de 20/21 de novembro de 1990.

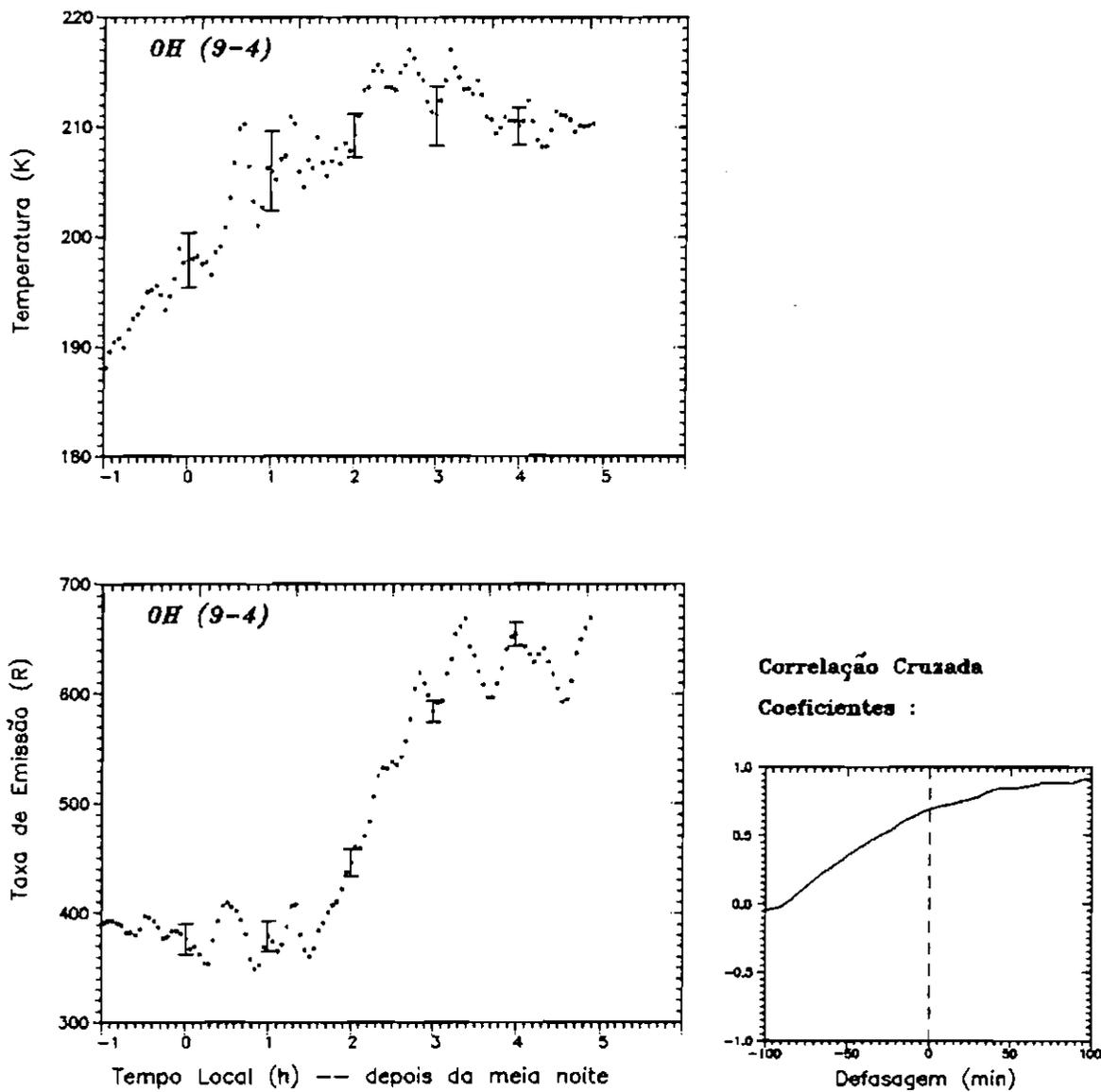


Fig. 5.18 - Idem à Figura 5.14, para o *nightglow* de 17/18 de abril de 1991.

CAPÍTULO 6

DADOS DO MULTI2. PARTE II: A PRESENÇA DE ONDAS DE GRAVIDADE NAS EMISSÕES DE $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$

A dinâmica da parte superior da média atmosfera, especialmente a região da mesopausa, é dominada pela propagação ascendente das ondas de gravidade e marés. A primeira tentativa teórica para explicar a relação entre as variações do *nightglow* e o movimento das ondas de gravidade foi efetuada por Krassovsky (1972), analisando uma série de medidas relativas à emissão da banda $OH^*(4-1)$. Ele introduziu o parâmetro η — quociente entre as flutuações na taxa de emissão relativa e as flutuações na temperatura relativa — e mostrou que este parâmetro comparava os efeitos da química e transporte sobre as emissões observadas, embora sua dedução matemática para η não tenha produzido uma boa coincidência com os dados. Desde então um grande número de observações do *nightglow* e modelos tentam elucidar, de forma mais detalhada, a atividade destas ondas e seus efeitos no balanço radiativo da região da mesopausa.

Poucas observações simultâneas de $OH^*(v')$ e $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ têm sido publicadas na literatura. Noxon (1978) detectou ondas de períodos na faixa de 1~2 horas nas medidas de temperatura rotacional, e mostrou que as propriedades características de propagação vertical das ondas de gravidade eram evidentes a partir destas observações. Contudo, ele não determinou o valor de η , talvez devido a uma argumentação errônea de Weinstock (1978), que concluía a respeito da incapacidade das taxas de emissão diagnosticarem os efeitos da dinâmica. Viereck e Deehr (1989) calcularam o parâmetro η para o $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(6-2)$ e obtiveram, pelo menos para ondas periódicas de 1 h ou mais, uma razoável concordância com os modelos recentes. Recentemente, Takahashi *et al.* (1992) calculou os valores de η para $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, usando uma série de medidas de variações correlacionadas entre intensidade e temperatura. Entretanto, o modo de análise para obtenção de η baseou-se em uma simples razão entre as amplitudes das variações temporais de B e T_m (estimativa do harmônico principal). A fase do parâmetro η não foi determinada. Seus resultados mostraram uma correlação muito baixa entre as

variações das amplitudes de intensidade de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, sugerindo que a resposta da intensidade frente a uma onda de gravidade deve depender de vários fatores químicos e dinâmicos.

A enorme variabilidade espacial e temporal do espectro das ondas de gravidade na média atmosfera é provavelmente a característica mais proeminente do comportamento destas ondas. Diversos fatores contribuem para este aspecto quase-caótico, entre os quais a natureza episódica das fontes de propagação e a interação complicada com o fluxo básico do ambiente. Não é objetivo deste trabalho preocupar-se com a origem das fontes que causam as flutuações nas camadas de *nightglow*; mas, antes de tudo, determinar-se as propriedades espectrais dos modos de propagação que são observados. Neste capítulo será descrita a técnica empregada para analisar estas estruturas de onda, bem como para obter os valores observados de η , referente às emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$ medidas pelo MULTI2.

6.1 - ALGORITMO PARA ANÁLISE DO ESPECTRO DAS ONDAS

A obtenção do conteúdo espectral será útil somente àquelas noites que apresentavam flutuações ondulatórias em ambas as quantidades: taxa de emissão e temperatura. Os dados foram reduzidos a duas séries temporais, para cada emissão, e os valores relativos dessas quantidades são analisados em conjunto. O objetivo final é a pesquisa de ondas quase-monocromáticas, tornando possível o cálculo do parâmetro η .

6.1.1 - O Método da Entropia Máxima (MEM)

O método da entropia máxima (MEM) foi originalmente proposto por Burg (1967) e, mais tarde, formalizado por Anderson (1974), para estimativa espectral de dados sísmicos. Atualmente, o MEM tem encontrado aceitação em diversas aplicações, onde componentes harmônicas devem ser detectadas e analisadas. A idéia do método repousa na escolha do melhor conjunto de parâmetros auto-regressivos, fornecidos diretamente pelos dados amostrados, que minimiza a soma bidirecional das potências médias dos erros de predição linear (o método opera para frente e para trás ao longo dos dados), desde que o conjunto de parâmetros otimizado satisfaça as recursões de Levinson. O conceito de maximização da entropia é conhecido da Teoria da Informação, e aqui empregado para referir-se à obtenção de um espec-

tro que corresponde a seqüência dos dados mais aleatória, com as auto-correlações correspondentes a um dado conjunto de valores.

O MEM foi a técnica empregada neste trabalho devido, sobretudo, aos seguintes atributos:

- a resolução da estimativa espectral é frequentemente muito superior do que a estimativa espectral linear proporcionada pelos métodos convencionais (*e.g.*, método de Blackman e Tuckey);
- é conveniente para tratar séries temporais relativamente curtas, *i.e.*, o método pode revelar periodicidades que excedam o comprimento dos dados;
- o tempo de computação requerido é da mesma ordem de magnitude do que os métodos convencionais de análise espectral.

Uma exposição detalhada a respeito das inúmeras particularidades envolvidas na dedução teórica da estimativa espectral do MEM está fora do escopo deste trabalho, porém uma breve descrição do algoritmo computacional e de sua saída será aqui apresentada (a teoria básica sobre o MEM é extensivamente considerada em Haykin, 1979 páginas 9-72).

Dado um conjunto X_n , $n = 1, 2, \dots, N$, sendo N o número de observações, tomadas em t_n e espaçadas uniformemente em intervalos de Δt . Os dados de média zero são definidos por:

$$x_n = \frac{X_n - \bar{X}}{\bar{X}}. \quad (6.1)$$

Desde que a série temporal $\{x_n\}$ seja um processo quase-estacionário, MEM é aplicável.

Usando de conceitos básicos da Teoria da Informação, a densidade espectral do MEM, $S_x(f)$, é estimada por

$$S_x(f) = \frac{P_M \Delta t}{\left| 1 - \sum_{m=1}^M a_m \exp(-i2\pi m f \Delta t) \right|^2}. \quad (6.2)$$

A freqüência f é limitada ao intervalo de Nyquist, $-1/(2\Delta t) \leq f \leq 1/(2\Delta t)$, P_M é a potência de saída do filtro de erro de previsão (erro mínimo quadrático), M é a ordem do filtro preditor, e a_m , $m = 0, 1, \dots, M$, são os coeficientes auto-regressivos.

A fim de calcular a estimativa da densidade espectral (equação 6.2), necessita-se conhecer a potência de saída P_M e os coeficientes auto-regressivos $a_m^{(M)}$.

As seguintes fórmulas recursivas de Levinson fornecem estas quantidades:

$$P_M = P_{M-1}(1 - |\varrho_M|^2), \quad (6.3)$$

$$a_m^{(M)} = \begin{cases} 1, & \text{para } m = 0 \\ \varrho_M, & \text{para } m = M \\ 0, & \text{para } m > M, \end{cases} \quad (6.4)$$

$$a_m^{(M)} = a_m^{(M-1)} + \varrho_M a_{M-m}^{(M-1)*}, \quad m = 0, 1, \dots, M, \quad (6.5)$$

onde os valores do conjunto $\{\varrho_m\}$, chamados de coeficientes de reflexão, são determinados minimizando-se o erro quadrático médio da predição (mínimos quadrados generalizados):

$$P_M = E[|e_n^{(M)}|^2], \quad (6.6)$$

sendo E o operador expectância e o coeficiente $e_n^{(M)}$ representa o erro residual no estágio M ,

$$e_{p,n}^{(M)} = \sum_{m=0}^M a_m^{(M)} x_{n-m}, \quad e_{r,n}^{(M)} = \sum_{m=0}^M a_{M-m}^{(M)*} x_{n-m}, \quad (6.7)$$

quando o filtro preditor linear é operado na direção progressa e regressa ao longo dos dados, respectivamente. A essência do MEM sugere que deve-se ter $P_M \leq P_{M-1}$. Assim, pela equação (6.3), deduz-se que $|\varrho_M| \leq 1$. Para garantir esta estabilidade, Burg (1967) sugeriu que a potência de predição poderia ser minimizada a partir da média aritmética de seus valores progressos (p) e regressos (r) ao longo dos dados. Desta forma, através de repetidos procedimentos de $\partial P_m / \partial \varrho_m = 0 \quad m = 1, \dots, M$, obtém-se uma expressão geral para os coeficientes de reflexão no estágio M de iteração:

$$\varrho_M = \frac{2 \sum_{n=M+1}^N e_{p,n}^{(M-1)} e_{r,n-1}^{(M-1)*}}{\sum_{n=M+1}^N (|e_{p,n}^{(M-1)}|^2 + |e_{r,n-1}^{(M-1)}|^2)}, \quad M = 1, 2, \dots \quad (6.8)$$

Em particular para $M = 0$, o algoritmo de Burg inicia com

$$P_0 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N |x_n|^2. \quad (6.9)$$

As fórmulas recursivas para calcular eficientemente os valores residuais de $e_{p,n}^{(M)}$ e $e_{r,n}^{(M)}$ podem ser obtidas manipulando convenientemente a expressão (6.5):

$$\begin{aligned} e_{p,n}^{(M)} &= e_{p,n}^{(M-1)} + \varrho_M e_{r,n-1}^{(M-1)*}, \\ e_{r,n}^{(M)} &= e_{r,n-1}^{(M-1)} + \varrho_M^* e_{p,n}^{(M-1)}, \\ e_{p,n}^{(0)} &= e_{r,n}^{(0)} = x_n \end{aligned} \quad (6.10)$$

Um programa de computador que estima o conteúdo espectral usando o MEM é fornecida no Apêndice A.

Qual o valor de M (ordem do filtro) mais apropriado para o projeto do filtro de predição? Em princípio o valor de M vai depender das propriedades estatísticas da série temporal em questão, embora exista métodos para sua otimização. Alguns critérios teóricos, como por exemplo o critério do *final prediction error* (FPE) desenvolvido por Akaike (1969), estima um valor ótimo, M_{ot} , quando a função

$$FPE(M) = \frac{N + M + 1}{N - M - 1} P_M \quad (6.11)$$

atinge um valor de mínimo absoluto. Porém na prática, estes critérios nem sempre fornecem bons resultados.

O procedimento adotado neste trabalho para determinar M_{ot} segue as orientações sugeridas por Kane *et al.* (1985). Em geral, eles observaram que, para valores pequenos de M , a estimativa espectral não tinha resolução suficiente; enquanto que, para valores muito grandes de M , as estimativas eram estatisticamente instáveis, com o aparecimento de frequências espúrias. Neste sentido, a escolha de M_{ot} foi tomada entre 0.3 a $0.6N$, onde N é o comprimento dos dados. Os resultados experimentais mostrados neste capítulo sustentam esta faixa de valores.

A separação da linha espectral, que consiste na ocorrência de dois ou mais picos de frequência onde apenas deveria existir um único pico espectral, e o deslocamento da linha espectral num espectro de várias componentes, devido aos efeitos dos picos vizinhos, são duas limitações do MEM bem conhecidas na literatura. Estes problemas tornam-se salientes em grandes valores de M e no caso de sinais com SNR (relação sinal-ruído) muito baixa. Para reduzir estes problemas, uma função janela de Hamming (Kaveh e Lippert, 1983),

$$w_l^M = 0,54 - 0,46 \cos \left(\frac{2\pi l}{N - M} + \frac{\pi}{N - M} \right) \quad l = 0, 1, \dots, N - (M + 1), \quad (6.12)$$

foi usada como fator peso no cálculo dos coeficientes de reflexão. O uso desta simples função melhorou a eficiência do algoritmo de Burg.

Os dados obtidos para a taxa de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ da noite de 25/26 de abril de 1990 podem exemplificar este método de análise. A Figura 6.1 mostra a taxa de emissão relativa, $(B - B_s)/B_s$, em função do tempo local acumulado em minutos. B_s representa o valor médio noturno da taxa de emissão. Nota-se o predomínio claro de uma tendência cíclica de período (linha sólida) maior que o comprimento da série temporal. Este comportamento, presente na maior parte das noites selecionadas, está provavelmente relacionado aos modos de propagação ascendente das marés atmosféricas (Takahashi *et al.* 1986). Estas baixas frequências são registradas também nas temperaturas rotacionais, mascarando por completo a estimativa espectral dos períodos menores.

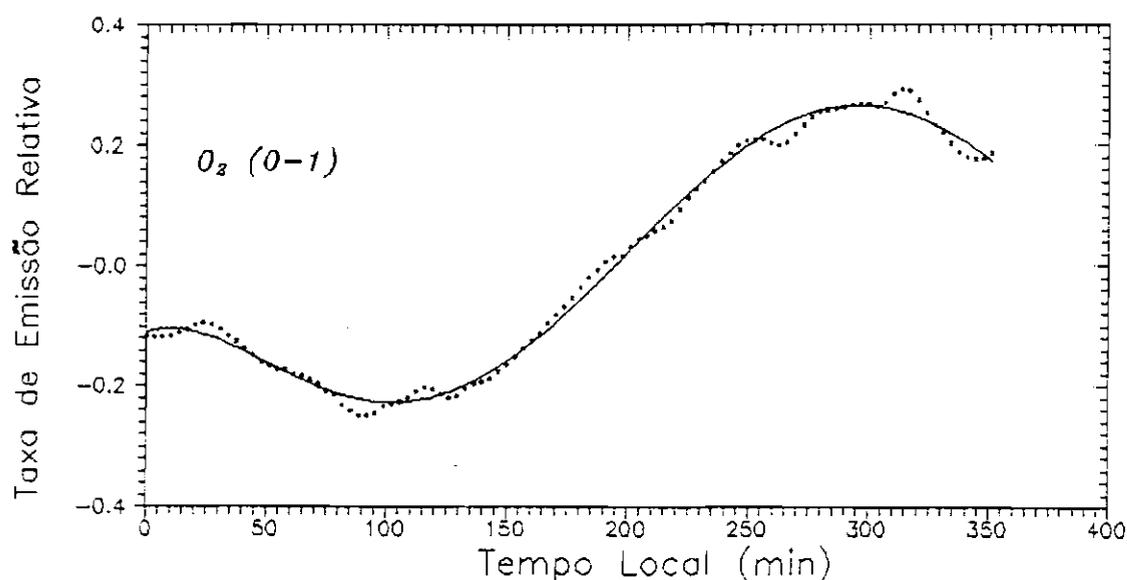


Fig. 6.1 - Taxa de emissão relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ observada na noite de 25/26 de abril de 1990. A linha sólida indica a presença de uma tendência cíclica nos dados.

O processo para gerar uma série temporal isenta de tendência cíclica requer uma estimativa aproximada do valor desta frequência. Neste caso o MEM pode ser útil, tendo em vista sua capacidade de predição além do limite dos dados. Então, conhecido o espectro de longo termo através do MEM, em geral constituído de um único período, determina-se a amplitude e fase correspondentes, usando o procedimento clássico dos mínimos quadrados a uma função senoidal (vide Seção 6.1.2). A subtração da série original pela série reconstruída desta forma (dita série de longo termo), produzirá a série temporal desejada.

O espectro da potência versus múltiplos do período de Nyquist¹² (em escala logarítmica) gerado para a noite de 25/26 de abril de 1990, depois de removida a curva de tendência, é exibido na Figura 6.2, para diversos valores da ordem do filtro de predição (M). Considerando $M = 0,3 N$, o espectro de potência mostra que os picos mais altos ocorrem em períodos de 62 min, 132 min, 41 min e 31 min, nesta ordem. Para $M = 0,4 N$, os picos acontecem em 63 min, 134 min, 43 min e 36 min. Finalmente, para $M = 0,5 N$, os picos sucedem-se em 63 min, 134 min, 43 min e 35 min. Nota-se aqui um reduzido efeito de deslocamento das linhas espectrais. A confiabilidade destes valores será discutida via análise de regressão múltipla para funções senoidais.

¹²Esta escala adimensional é obtida dividindo o período (em minutos) pelo intervalo de tempo Δt (constante) da série (em minutos). Por conveniência, o logaritmo decimal desta fração também é utilizado.

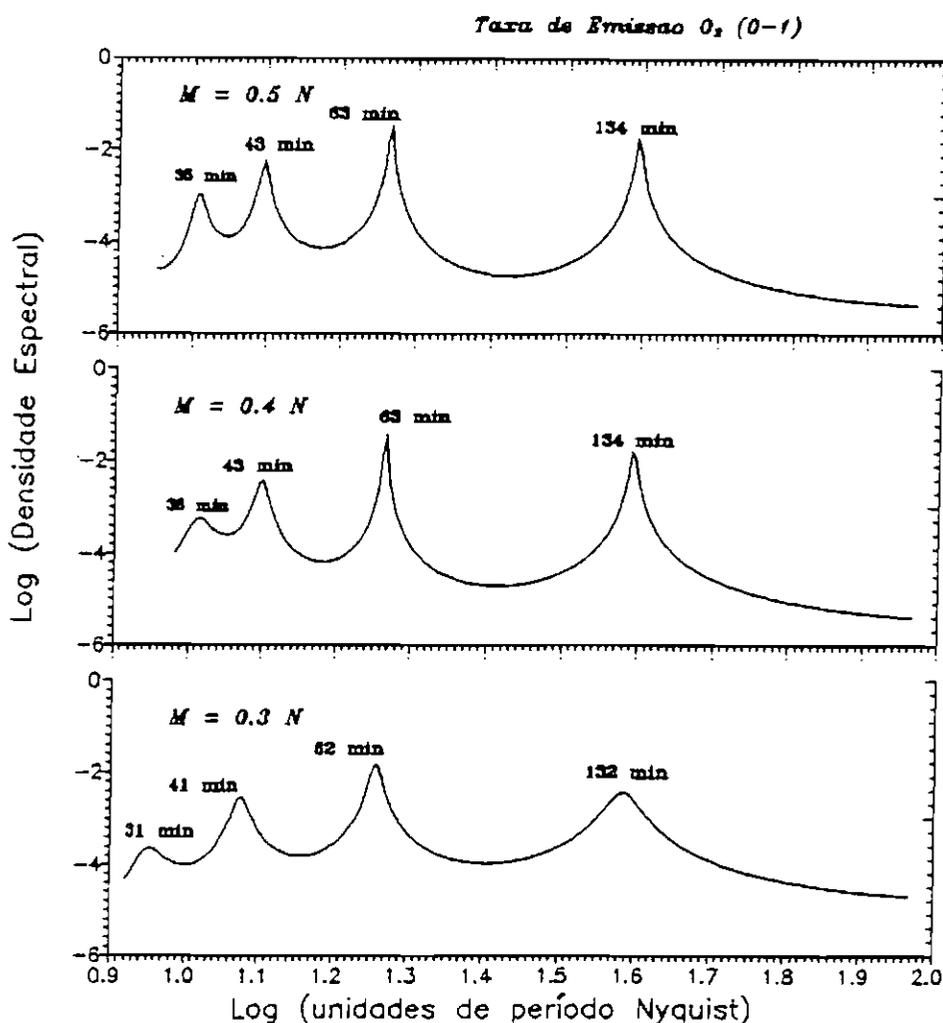


Fig. 6.2 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ para a noite de 25/26 de abril de 1990, usando valores diferentes de M . Os picos de amplitude representam as periodicidades encontradas pelo MEM.

6.1.2 - Estimativa da Amplitude e Fase pelo Método dos Mínimos Quadrados

Lacoss (1971) demonstrou que a densidade de potência espectral de um dado sinal predito pelo MEM é proporcional à área sob o pico e não à altura do pico. Esta verificação deixa muito imprecisa a dedução das amplitudes e fases correspondentes aos sinais. Este defeito é remediável caso a reconstrução da série temporal original seja possível através de uma análise de regressão múltipla, onde o conteúdo das frequências, $\{\omega_k\}$, seja conhecido do MEM e a amplitude e fase

características para cada modo espectral sejam determinados pelo método clássico dos mínimos quadrados.

Considere o seguinte modelo de ajuste:

$$\begin{aligned}\hat{x}(t) &= A_0 + \sum_{k=1}^K (A_k \cos \omega_k t + B_k \sin \omega_k t) + \epsilon(t) \\ &= A_0 + \sum_{k=1}^K R_k \cos(\omega_k t - \phi_k) + \epsilon(t),\end{aligned}\quad (6.13)$$

onde K é o número de períodos $2\pi/\omega_k$ e $\epsilon(t)$ denota o t -ésimo resíduo (qualidade do ajuste). Isto conduz à minimização de

$$\sum_{n=1}^N (x_n - \hat{x}(t))^2 = T(A_0, A_k, B_k, \omega_k). \quad (6.14)$$

Fixando os valores de ω_k , o modelo de ajuste torna-se linear nos parâmetros que permanecem. O procedimento padrão para obter os valores mínimos (ótimos) destes parâmetros pode ser aplicado. Representa-se pela função U o resultado deste cálculo:

$$U(\omega_k) = T(\hat{A}_0, \hat{A}_k, \hat{B}_k, \omega_k) = \frac{\partial T(\dots)}{\partial(\dots)} = 0.$$

Um programa de computador que estima os valores ótimos de A_0 , A_k e B_k , bem como os desvios padrões correlatos, é fornecido no Apêndice A. As amplitudes R_k , as fases ϕ_k e os desvios padrões correspondentes, σ_k , também são obtidos.

Uma estimativa muito apropriada para o conteúdo de potência de um sinal pode ser obtida relacionando o valor médio quadrático do sinal,

$$\overline{R_k \cos(\omega_k t - \phi_k)^2} = R_k^2 \overline{\cos^2(\omega_k t - \phi_k)} = R_k^2/2,$$

com a variância total, σ^2 da série reconstruída. A quantidade,

$$\frac{R_k^2/2}{\sigma^2} \times 100 \quad (\%) \quad (6.15)$$

é também chamada de razão sinal-ruído percentual (SNR). A qualidade global do ajuste pode ser medida pelo coeficiente de correlação múltipla r^2 (calculado pela subrotina de predição) ou pelo somatório $\sum_k \text{SNR}$ — para uma reconstrução perfeita do sinal original, o somatório de SNR deve tender a 100%.

As amplitudes e fases das ondas concernentes ao espectro de potência gerado pelo MEM para a taxa de emissão relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, na noite de 25/26 de abril de 1990 (conforme exemplo considerado anteriormente), estão listadas

na Tabela 6.1. O valor de A_0 é aproximadamente nulo. A Figura 6.3 mostra a curva de ajuste sobreposta aos dados originais para esta noite. A curva de ajuste, neste caso, contém quatro modos espectrais, com períodos de 35 min, 43 min, 63 min e 134 min. O sinal mais significativo possui um período de 63 min (a relação SNR está na faixa de 42%), vide Tabela 6.1.

TABELA 6.1 - AMPLITUDE E FASE DE CADA MODO DE PROPAGAÇÃO PRESENTES NA TAXA DE EMISSÃO RELATIVA DE $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, NA NOITE DE 25/26 DE ABRIL DE 1990

Período (min)	Amplitude(R)	σ_R	Fase(ϕ)($^\circ$)	σ_ϕ ($^\circ$)	SNR (%)
35.13	0,0059	0,0009	34,75	9,19	10,08
42.70	0,0070	0,0009	-65,59	7,82	14,14
63.17	0,0120	0,0010	105,25	4,46	42,14
133,53	0,0058	0,0009	90,75	9,37	9,92
					$\sum_k \text{SNR} = 76,28$
Coef. de correlação múltipla (r^2) = 0,80					

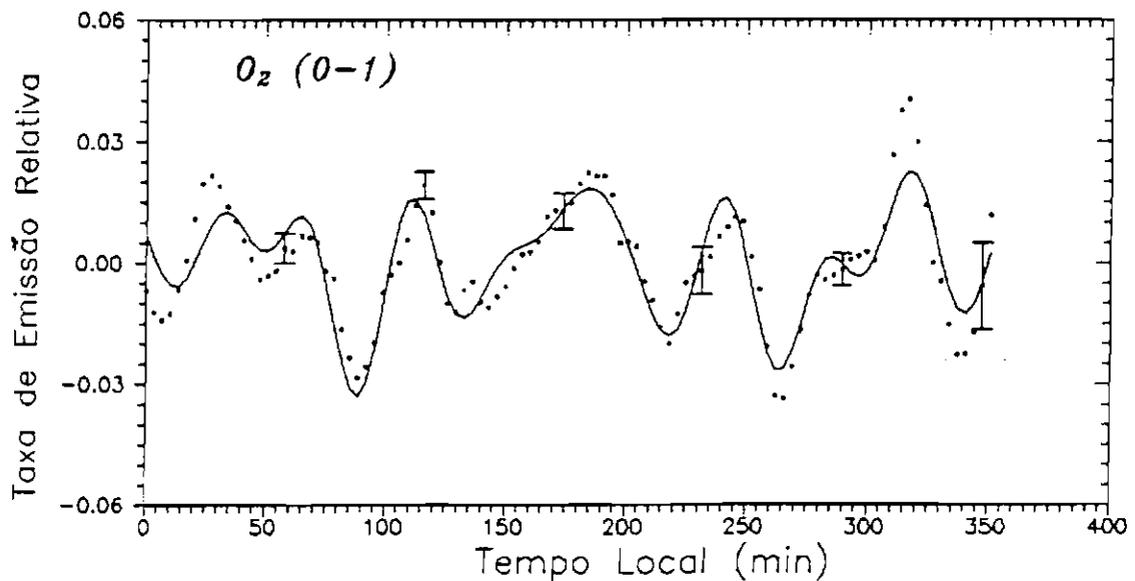


Fig. 6.3 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta às flutuações relativas da taxa de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, observadas na noite de 25/26 de abril de 1990. As barras de erro, neste caso, referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

As ondas que apresentam amplitudes pequenas e relação SNR baixa são mais difíceis de caracterizar. Os modos de propagação de períodos mais curtos

do que 30 min, observados nas medidas da temperatura e taxa de emissão, estão próximos do nível de ruído do experimento. Embora o período mínimo medido pelo MULTI2 seja de aproximadamente 6.7 min (em torno da frequência de Brunt Väisälä), as ondas que realmente podem ser distinguidas têm períodos maior do que 30 min.

6.2 - MEDIDA DE η

A razão entre as flutuações relativas da taxa de emissão e temperatura estão relacionadas pelo parâmetro η , definido como

$$\eta = \frac{(B - B_0)}{B_0} \bigg/ \frac{(T_m - T_{m0})}{T_{m0}}. \quad (6.16)$$

onde as quantidades B_0 e T_{m0} (parte não perturbada) são representadas pela média noturna dos valores de B e T_m , respectivamente. Quando a taxa de emissão relativa e a temperatura relativa forem ambas funções sinusoidais harmônicas, tal que

$$\frac{B - B_0}{B_0} = R_B e^{i(\omega t - \phi_B)}, \quad (6.17)$$

$$\frac{T_m - T_{m0}}{T_{m0}} = R_{T_m} e^{i(\omega t - \phi_{T_m})}, \quad (6.18)$$

sendo R e ϕ as amplitudes e fases relacionadas a cada modo espectral ω , então

$$\eta = |\eta| e^{-i\Phi} \quad (6.19)$$

onde,

$$\begin{aligned} |\eta| &= \frac{R_B}{R_{T_m}} \\ \Phi &= \phi_B - \phi_{T_m}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Nas seções anteriores foi mostrado e exemplificado como inferir-se os valores de R_B e ϕ_B . A metodologia para calcular R_{T_m} e ϕ_{T_m} é a mesma, apenas que a magnitude das flutuações na temperatura são relativamente menores do que as observadas na taxa de emissão e a relação sinal-ruído é comparativamente mais baixa.

Assim, quando aplica-se a metodologia para a temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 25/26 de abril de 1990, encontra-se três modos espectrais relevantes, de períodos 64 min, 118 min e 41 min, em ordem de importância. A Figura 6.4 faz uma comparação entre o espectro de potência obtido para a taxa de emissão relativa e a temperatura. Nota-se um pequeno deslocamento em períodos menores e

um deslocamento de 10% no período mais alto. A linha espectral de período 63 min é a mais saliente em ambas as quantidades. A Tabela 6.2 lista os valores de R_{T_m} , ϕ_{T_m} e os valores correspondentes dos desvios padrões. A Figura 6.5 mostra a curva de ajuste sobreposta aos dados originais da temperatura relativa. De modo geral, a qualidade do ajuste dos dados de temperatura é inferior ao ajuste dos dados de taxa de emissão.

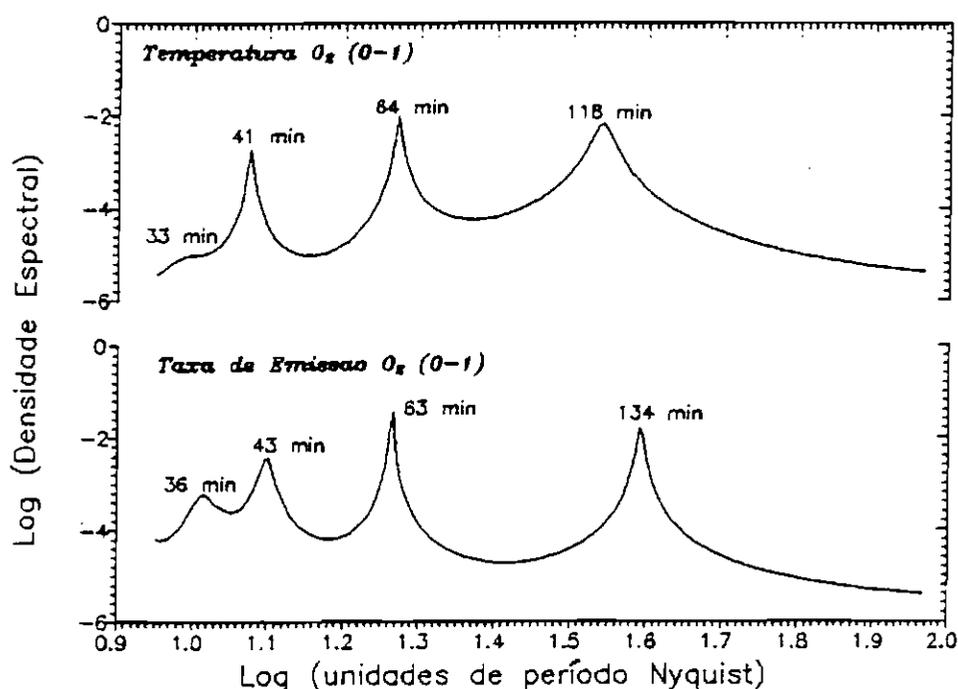


Fig. 6.4 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ para a noite de 25/26 de abril de 1990.

TABELA 6.2 - AMPLITUDE E FASE DE CADA MODO DE PROPAGAÇÃO PRESENTES NA TEMPERATURA RELATIVA DE $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, NA NOITE DE 25/26 DE ABRIL DE 1990.

Período (min)	Amplitude (R)	σ_R	Fase (ϕ) ($^\circ$)	σ_ϕ ($^\circ$)	SNR (%)
33,14	0,0015	0,0007	43,57	26,31	1,44
40,77	0,0047	0,0007	5,65	8,60	13,24
63,92	0,0076	0,0007	103,29	5,39	35,56
118,13	0,0075	0,0007	-115,45	5,25	34,92
					$\sum_k \text{SNR} = 83,72$
Coef. de correlação múltipla (r^2) = 0,74					

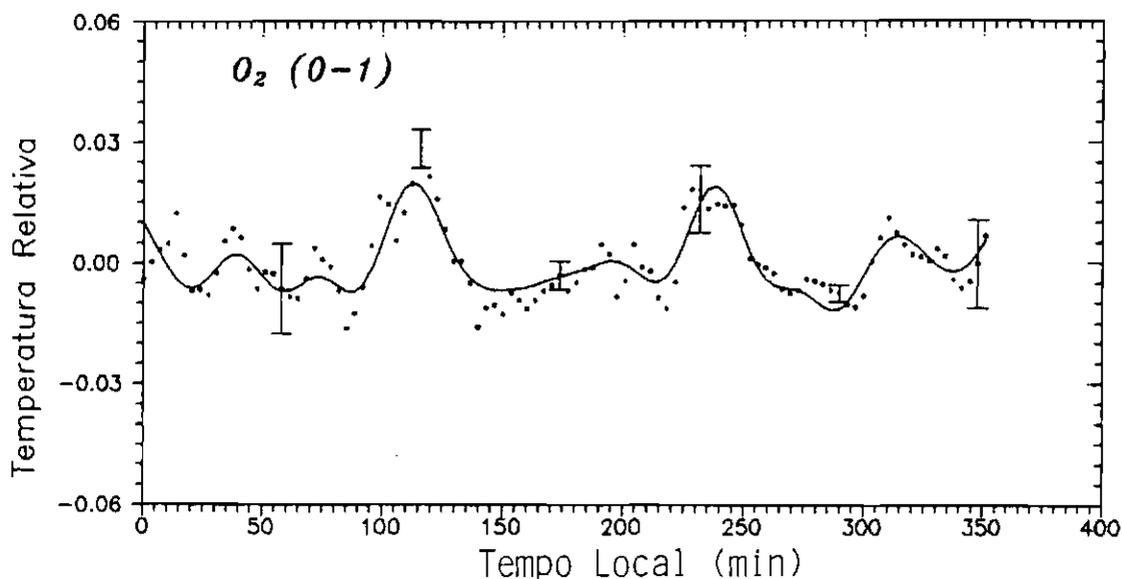


Fig. 6.5 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta às flutuações relativas da temperatura de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, observadas na noite de 25/26 de abril de 1990. As barras de erro, neste caso, referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

Assumindo que as oscilações observadas na taxa de emissão e temperatura sejam causadas pela mesma onda de gravidade, então estas oscilações devem ter o mesmo período.¹³ Levando isto em consideração, o cálculo do parâmetro η apresenta confiabilidade caso exista essa coincidência espectral entre os sinais, não somente nas posições relativas dos picos, mas, sobretudo, nas suas respectivas potências — a relação SNR é um parâmetro muito útil para avaliar a potência relativa do sinal. Considerando como exemplo as medidas de *nightglow* de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 25/26 de abril de 1990, conclui-se que pelo menos dois modos de propagação, de periodicidades 43 min e 63 min, enquadram-se nos requisitos acima. O período de 43 min fornece, tomando os valores das amplitudes da taxa de emissão relativa e temperatura relativa para esta onda (vide Tabelas 6.1 e 6.2), os seguintes resultados para $|\eta| = 1,5 \pm 0,3$ e $\Phi = -71^\circ \pm 12^\circ$, conforme a equação (6.20); analogamente para o período de 63 min, os resultados para $|\eta| = 1,8 \pm 0,2$ e $\Phi = 2^\circ \pm 7^\circ$. A estimativa de erro no cálculo de η resulta da propagação dos erros inerentes às amplitudes e fases de B e T_m (vide Tabelas 6.1 e 6.2).

¹³Ensaio realizado com séries temporais artificiais usando o MEM mostram que o erro cometido na predição das posições dos picos não deve exceder a 10% do valor correto (Kane *et al.* 1985).

6.3 - RESULTADOS II: η CALCULADO ATRAVÉS DAS OBSERVAÇÕES

Um total de 12 eventos ondulatorios foram analisados a partir das observações de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ nas 9 noites selecionadas no Capítulo 5. Alguns comentários relativos a cada uma das noites seguem logo abaixo.

- *Noite de 23/24 de abril de 1990.*

Os espectros de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa são exibidos na Figura 6.6. Existem 3 picos significantes em ambos os espectros. A curva de ajuste para a taxa de emissão relativa é composta de 3 ondas, com períodos de 56 min, 82 min e 241 min; identicamente, a curva de ajuste da temperatura relativa compõem-se de 3 ondas, com períodos de 52 min, 81 min e 274 min (Figura 6.7). A relação SNR é alta para a onda de 82 min em ambos os espectros.

- *Noite de 25/26 de abril de 1990.*

Esta noite foi exaustivamente examinada nas seções anteriores. Três significantes modos espectrais foram encontrados, embora a onda de maior período apresentasse um valor muito baixo para SNR.

- *Noite de 23/24 de maio de 1990.*

Sobre esta noite nota-se a presença de 4 picos em cada espectro de potência, conforme identifica a Figura 6.8. O espectro da taxa de emissão relativa apresenta as posições de máximos em 42 min, 60 min, 86 min e 133 min. O espectro da temperatura relativa apresenta estes picos em 40 min, 66 min, 85 min e 184 min. As curvas de ajuste, mostradas na Figura 6.9, contêm, respectivamente, estes períodos. A onda de 86 min apresenta o melhor índice de SNR entre as demais.

- *Noite de 26/27 de maio de 1990*

O espectro de potência da taxa de emissão relativa mostra um pico expressivo (ótimo nível de SNR) no período de 142 min (Figura 6.10). Isto revela-se consistente com o espectro de potência da temperatura relativa. A Figura 6.11 mostra as curvas de ajuste, que são compostas de 4 ondas com períodos de 38 min, 44 min, 87 min e 142 min, no caso da taxa de emissão relativa; e 5 ondas com períodos de 39 min, 47 min, 61 min, 82 min e 142 min, no caso da temperatura relativa.

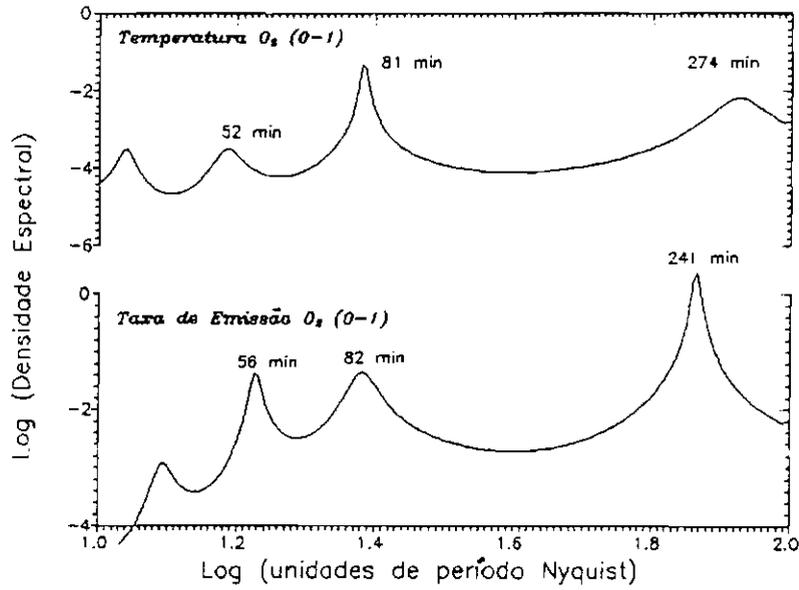


Fig. 6.6 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 23/24 de abril de 1990.

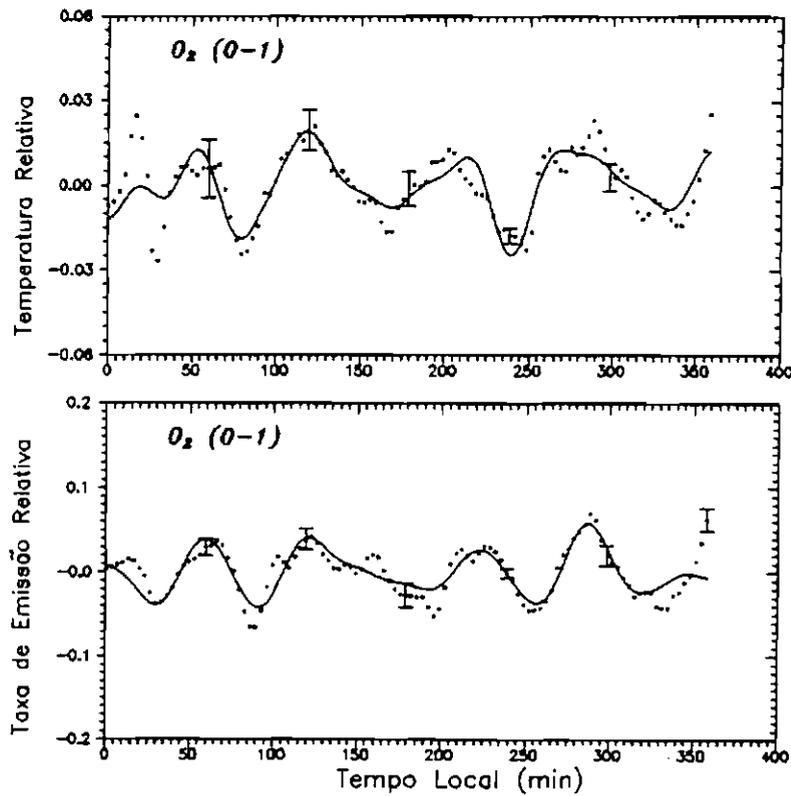


Fig. 6.7 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 23/24 de abril de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

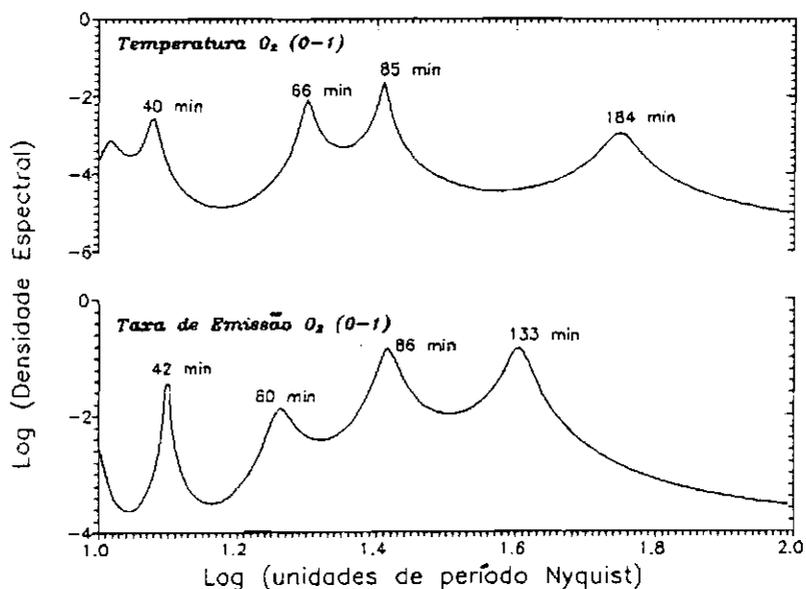


Fig. 6.8 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 23/24 de maio de 1990.

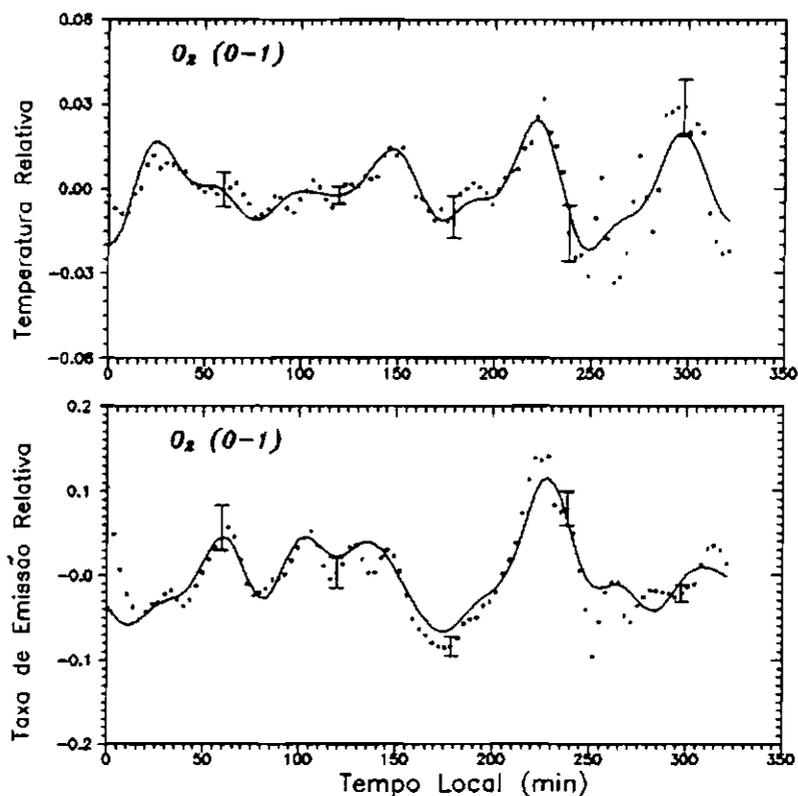


Fig. 6.9 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 23/24 de maio de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

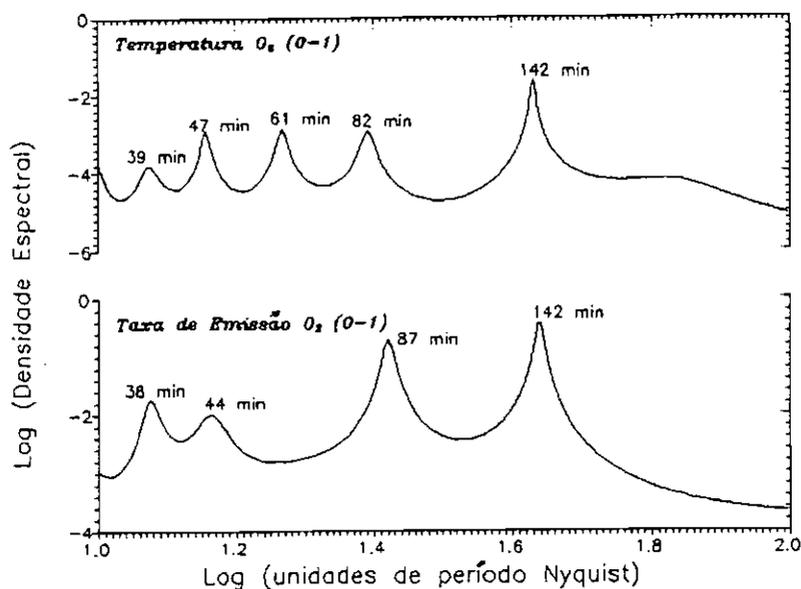


Fig. 6.10 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 26/27 de maio de 1990.

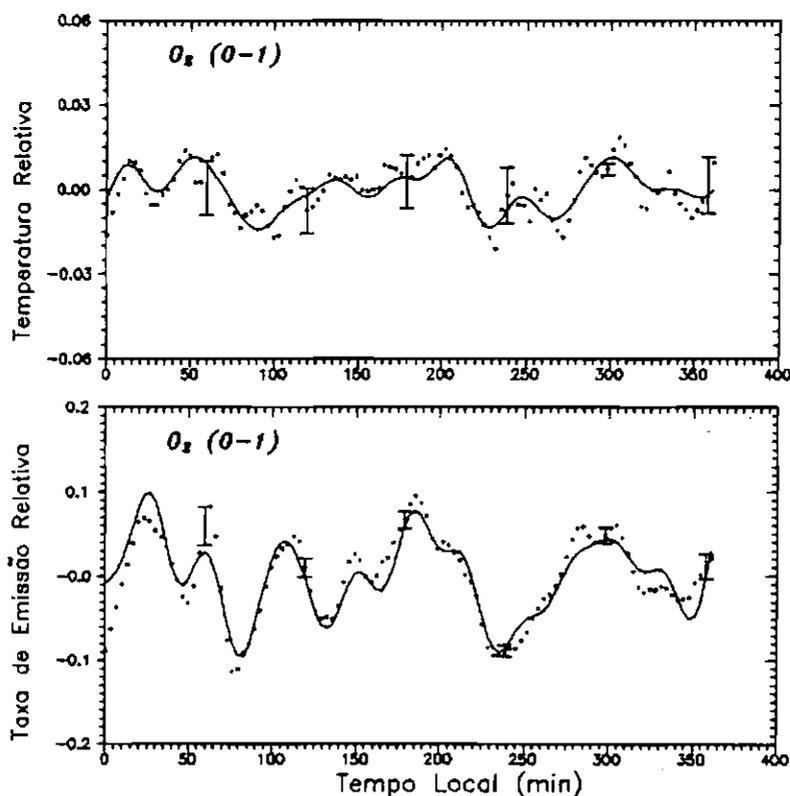


Fig. 6.11 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 26/27 de maio de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

- *Noite de 21/22 de junho de 1990.*

As variações ondulatórias estão nitidamente presentes tanto na taxa de emissão relativa quanto na temperatura relativa, conforme revela a Figura 6.12. As periodicidades de 39 min, 53 min e 97 min são observadas nas duas quantidades, embora a onda de maior período destaca-se entre elas, apresentando um SNR de 71%. A Figura 6.13 mostra os ajustes proporcionados pelo somatório destes modos de propagação.
- *Noite de 24/25 de junho de 1990.*

Nesta noite observa-se dois picos significantes, em 73 min e 132 min, nos dados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa (Figura 6.14). A Figura 6.15 fornece as curvas de ajuste que envolvem a soma de 4 ondas (39 min, 52 min, 73 min e 132 min) para a taxa de emissão relativa e também 4 ondas (42 min, 60 min, 73 min e 138 min) para a temperatura relativa.
- *Noite de 16/17 de setembro de 1990.*

Apesar dos espectros de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa não apresentarem boa concordância, conforme evidencia a Figura 6.16, a onda de período em torno de 103 min é muito significativa, em ambos os espectros. A relação SNR para este sinal é aproximadamente 50%. O ajuste da temperatura relativa contém apenas 3 ondas (47 min, 56 min e 108 min), enquanto que a taxa de emissão relativa tem 4 ondas (40 min, 51 min, 71 min e 103 min), conforme vê-se na Figura 6.17.
- *Noite de 14/15 de novembro de 1990.*

Os espectros de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa são muito similares (Figura 6.18). Um pico espetacular em torno de 108 min caracteriza definitivamente as variações ondulatórias observadas nas medidas de *nightglow*. As curvas de ajuste mostradas na Figura 6.19 contém a soma de 3 modos de propagação, com períodos de 43 min, 71 min e 108 min.
- *Noite de 21/22 de novembro de 1990.*

Dois picos coincidentes, em 45 min e 107 min, mostram-se significantes da análise dos espectros de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa (Figura 6.20). As curvas de ajuste exibidas na Figura 6.21 levam em conta estes períodos.

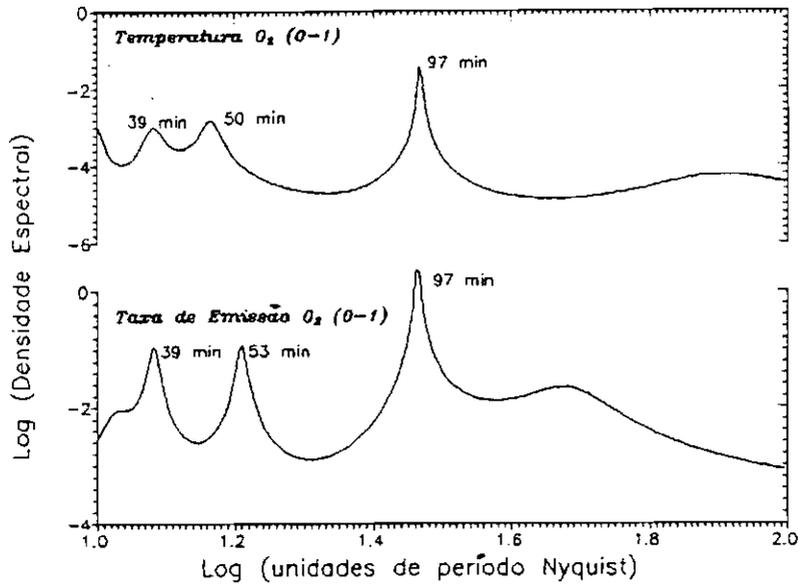


Fig. 6.12 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 21/22 de junho de 1990.

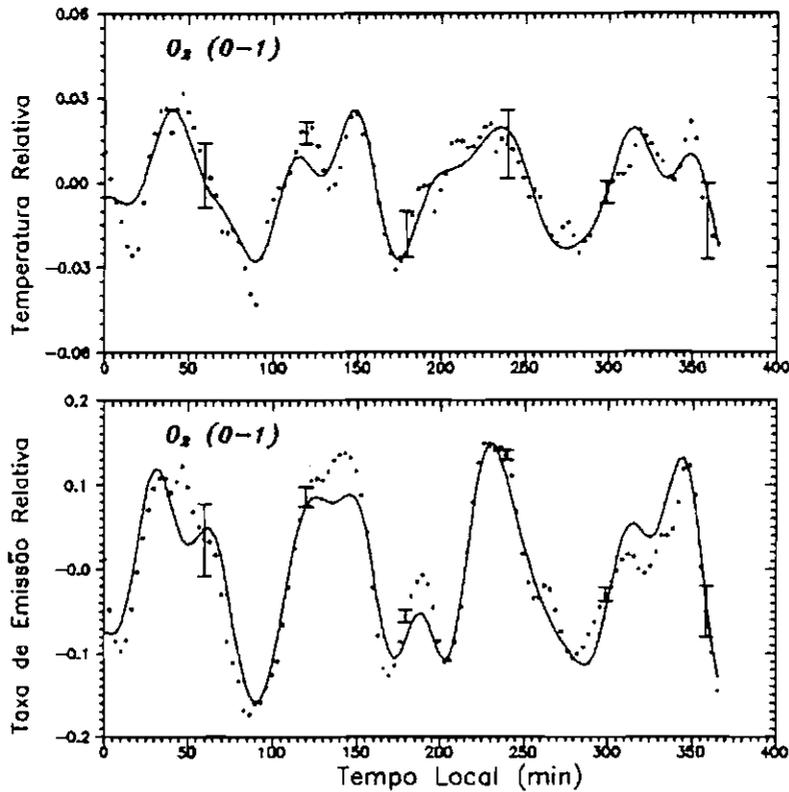


Fig. 6.13 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 21/22 de junho de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

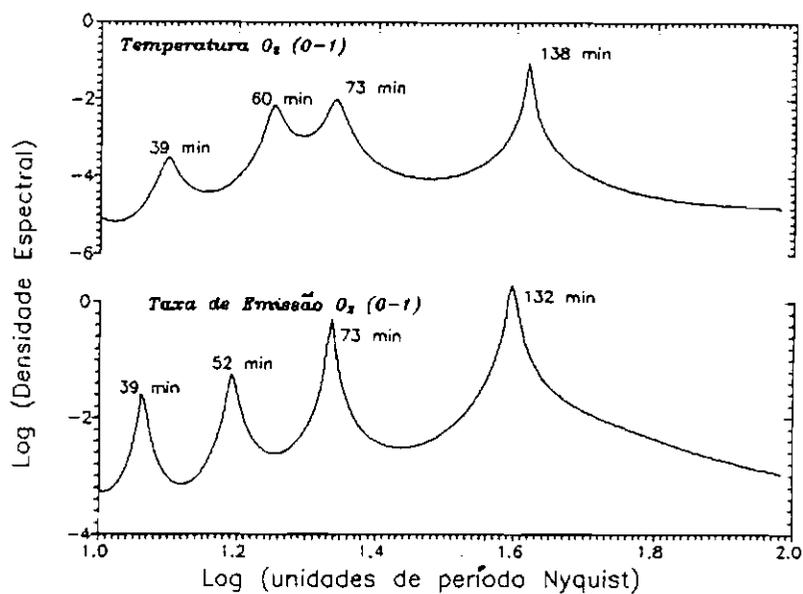


Fig. 6.14 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 24/25 de junho de 1990.

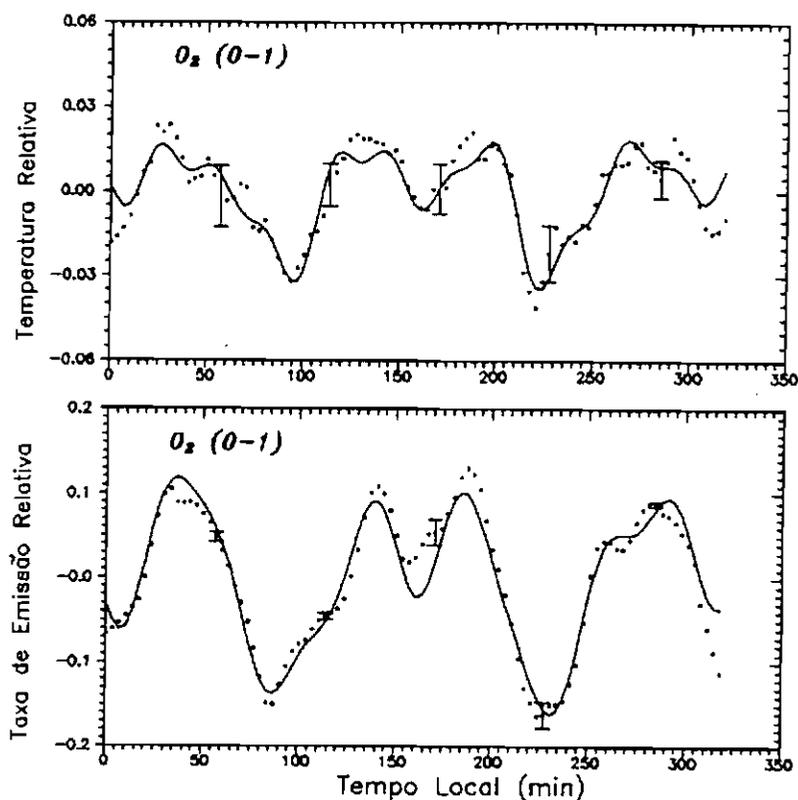


Fig. 6.15 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 24/25 de junho de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

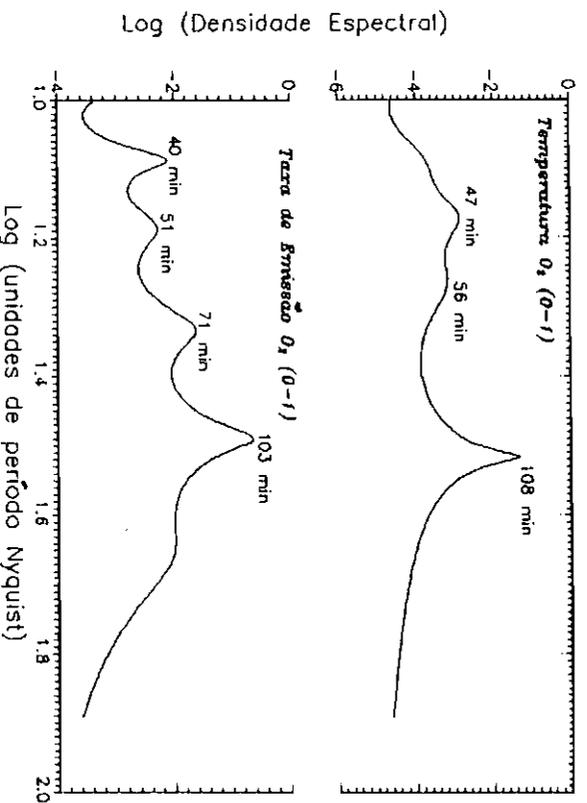


Fig. 6.16 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(l^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 16/17 de setembro de 1990.

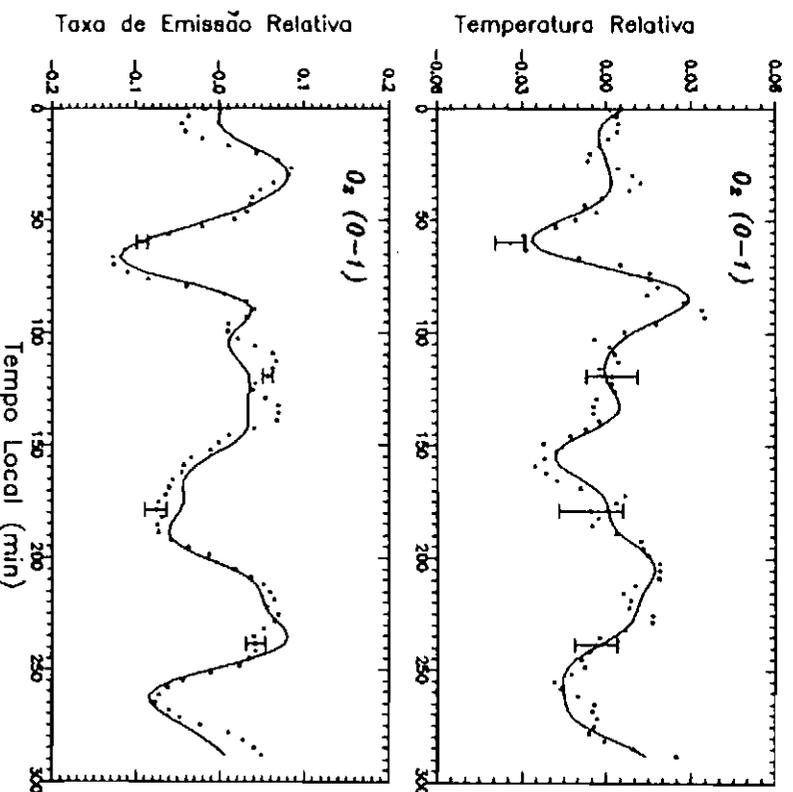


Fig. 6.17 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(l^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 16/17 de setembro de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

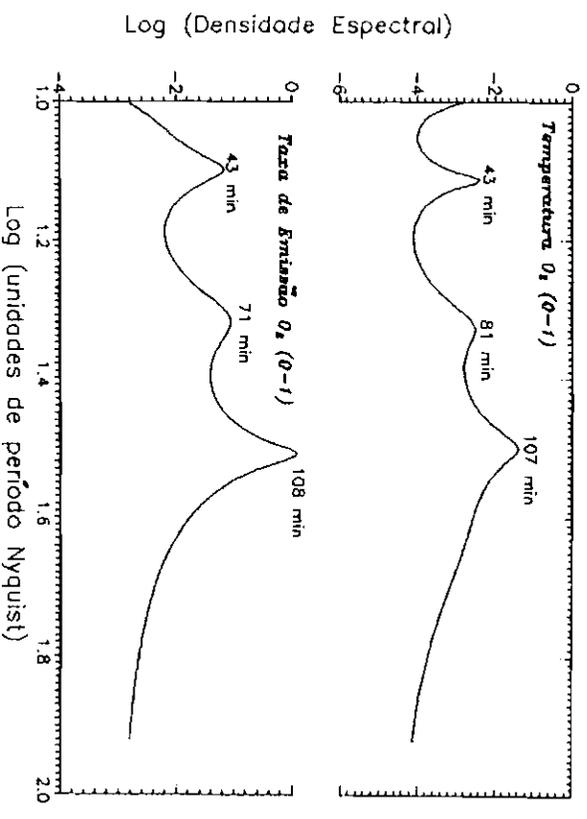


Fig. 6.18 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 14/15 de novembro de 1990.

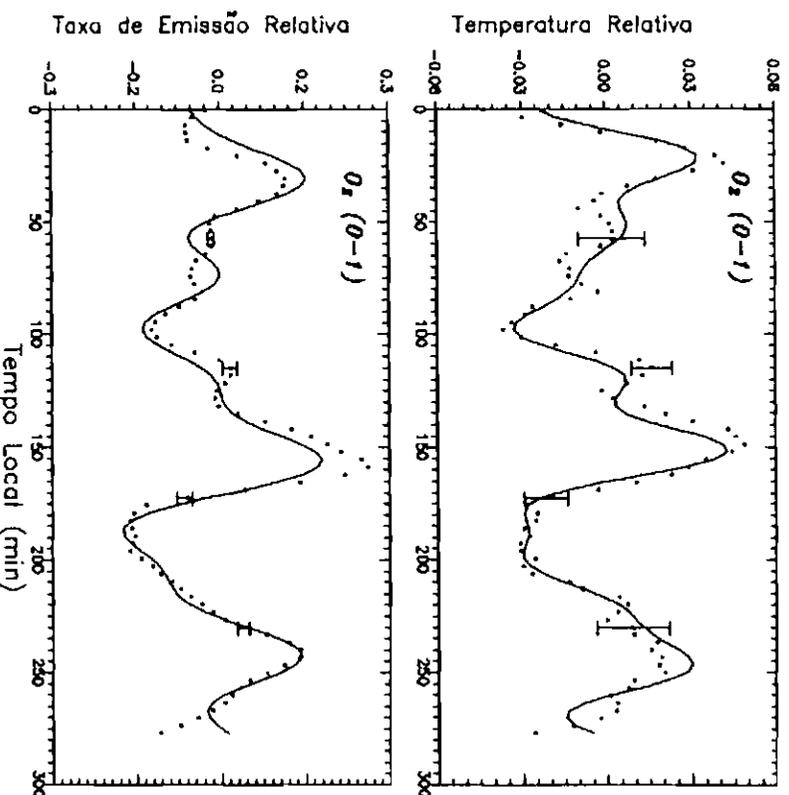


Fig. 6.19 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 14/15 de novembro de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

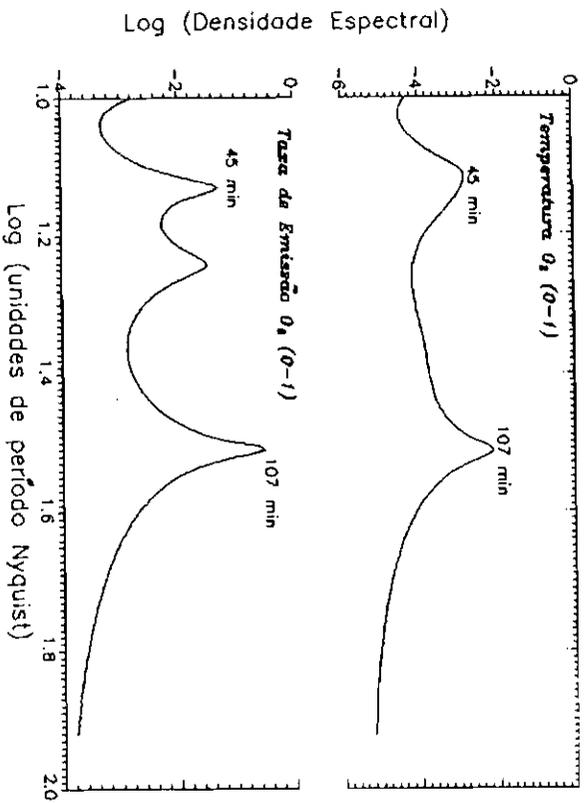


Fig. 6.20 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(\delta^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 21/22 de novembro de 1990.

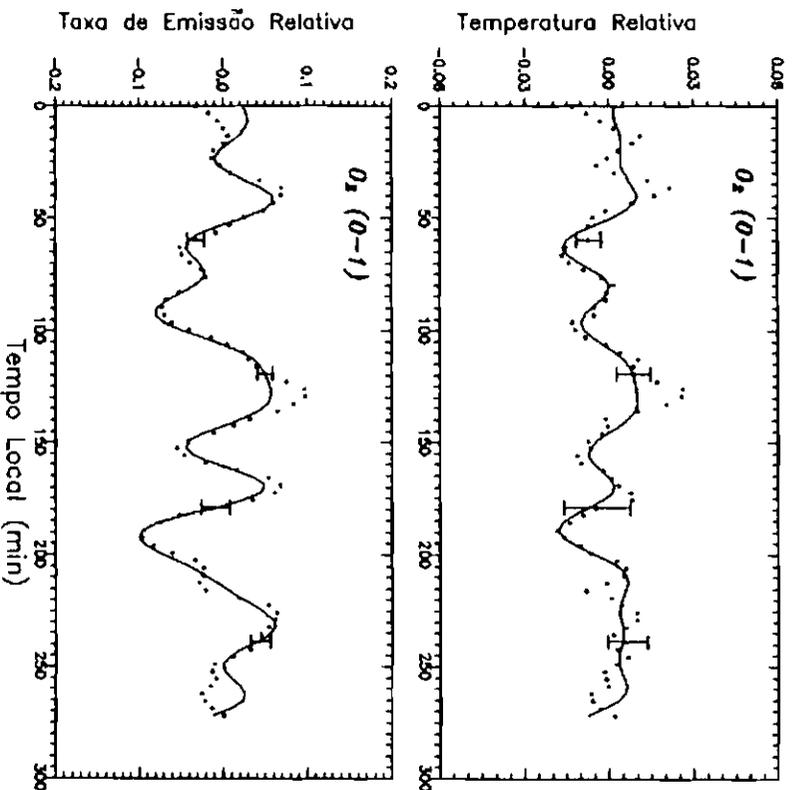


Fig. 6.21 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $O_2(\delta^1\Sigma_g^+, 0-1)$ na noite de 21/22 de novembro de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

Considerando agora as observações de $\text{OH}^*(9-4)$, das 5 noites selecionadas no Capítulo 5 um total de 8 eventos ondulatórios foram analisados. Alguns comentários relativos a cada uma dessas noite seguem logo abaixo.

- *Noite de 29/30 de janeiro de 1990.*

O espectro de potência da taxa de emissão revela 4 ondas com períodos de 41 min, 56 min, 79 min e 144 min. Por sua vez, o espectro de potência da temperatura relativa mostra 3 picos em 41 min, 68 min e 115 min (Figura 6.22). Exceto o período de 41 min, que apresenta uma relação sinal-ruído (SNR) razoável, as periodicidades não coincidem. As curvas de ajuste para a taxa de emissão relativa e temperatura relativa são mostradas na Figura 6.23. A qualidade destes ajustes é baixa.

- *Noite de 21/22 de junho de 1990.*

Os espectros de potência da taxa de emissão relativa e da temperatura relativa são similares e mostram um pico significativo em 89 min, com SNR alta (Figura 6.24). Com relação ao período de 181 min, detectado no espectro de B , a amplitude do sinal correspondente ao espectro de T_m (o sinal é deslocado em 5 min) possui SNR muito baixa, motivo pelo qual o cálculo do parâmetro η não é confiável. Quatro ondas de periodicidades 39 min, 57 min, 89 min e 181 min compõem as curvas de ajustes apresentadas na Figura 6.25.

- *Noite de 23/24 de junho de 1990.*

Nesta noite ocorrem dois picos significantes em períodos de 63 min e 124 min, conforme atestam os espectros de potência para a taxa de emissão relativa e temperatura relativa (Figura 6.26). As curvas de ajuste são compostas de 3 ondas para a taxa de emissão relativa (49 min, 63 min e 124 min) e 2 ondas para a temperatura relativa (62 min e 124 min). A qualidade dos ajustes é baixa (Figura 6.27).

- *Noite de 20/21 de novembro de 1990.*

Esta noite revela dois picos significantes em períodos de 40 min e 65 min (Figura 6.28). O período de 107 min, presente no espectro de potência da temperatura relativa, surge deslocado em 10% no espectro da taxa de emissão relativa. As curvas de ajuste, apresentadas na Figura 6.29, são compostas destas 3 ondas.

- *Noite de 17/18 de abril de 1991.*

Dois picos coincidentes em períodos de 42 min e 126 min encontram-se presentes nos espectros de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa (Figura 6.30). A relação SNR para o período de 55 min é muito baixa no espectro da temperatura. Os ajustes apresentados na Figura 6.31 contêm três modos de propagação: 42 min, 55 min e 126 min.

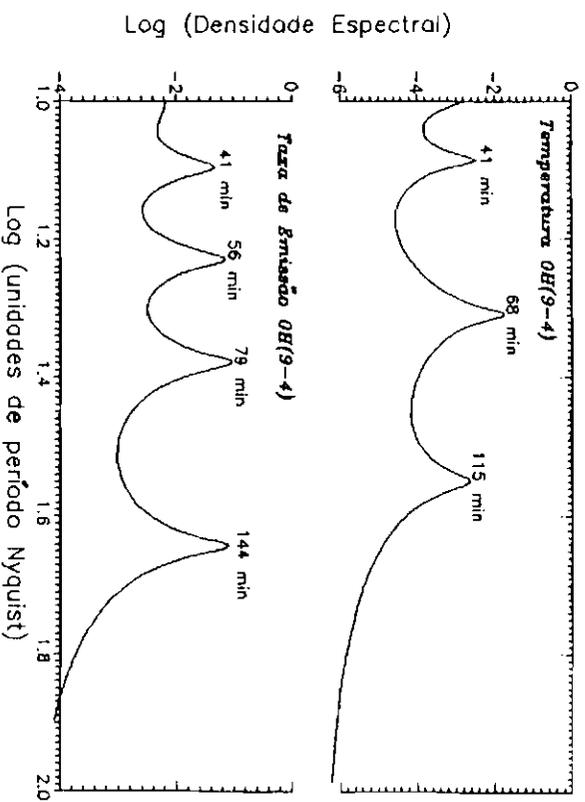


Fig. 6.22 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^*(9-4)$ na noite de 29/30 de janeiro de 1990.

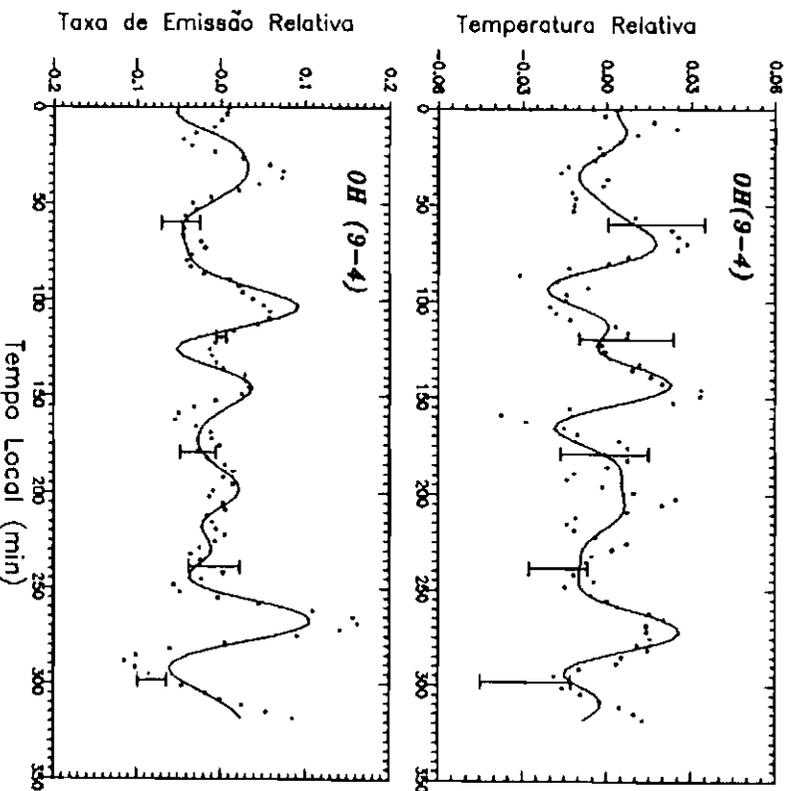


Fig. 6.23 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^*(9-4)$ na noite de 29/30 de janeiro 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

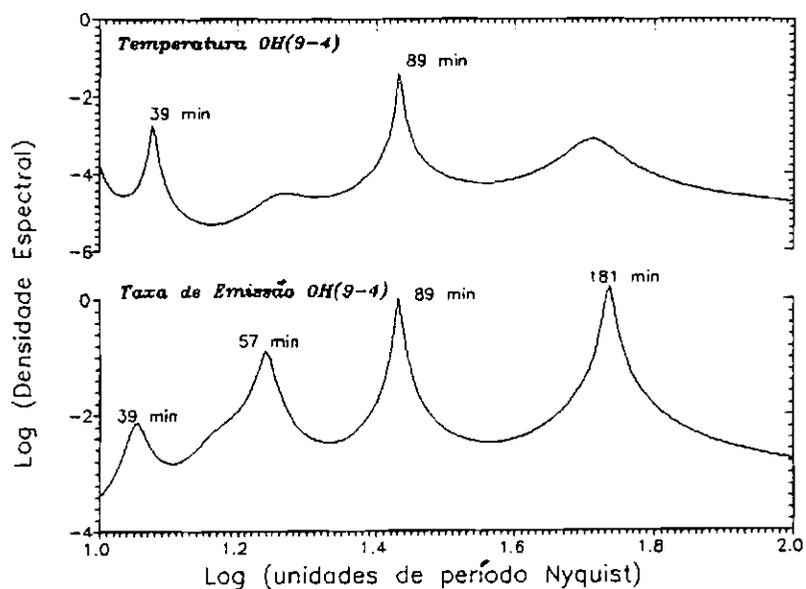


Fig. 6.24 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^*(9-4)$ na noite de 21/22 de junho de 1990.

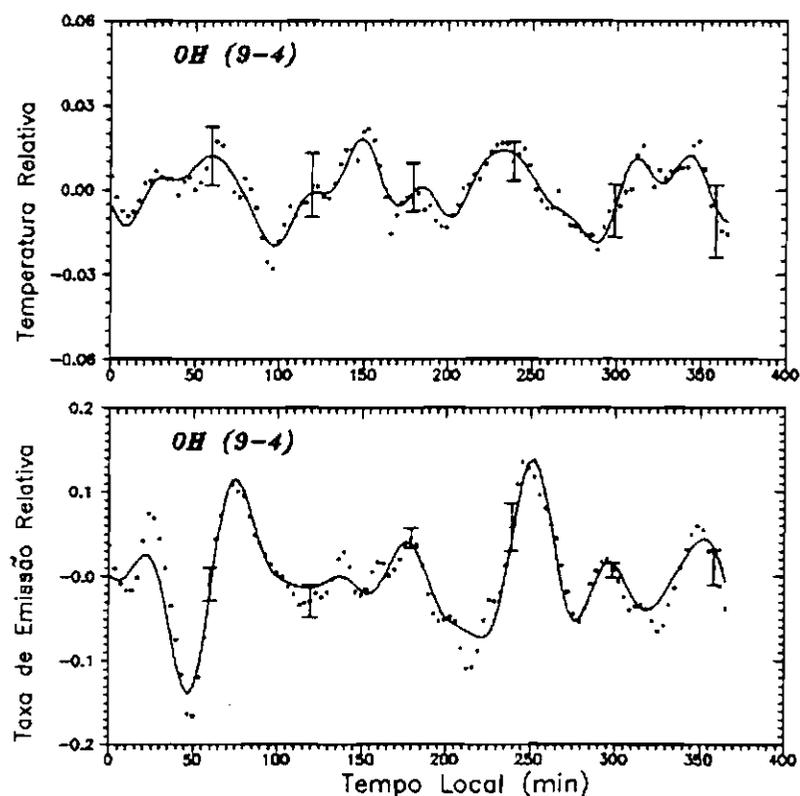


Fig. 6.25 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^*(9-4)$ na noite de 21/22 de junho de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

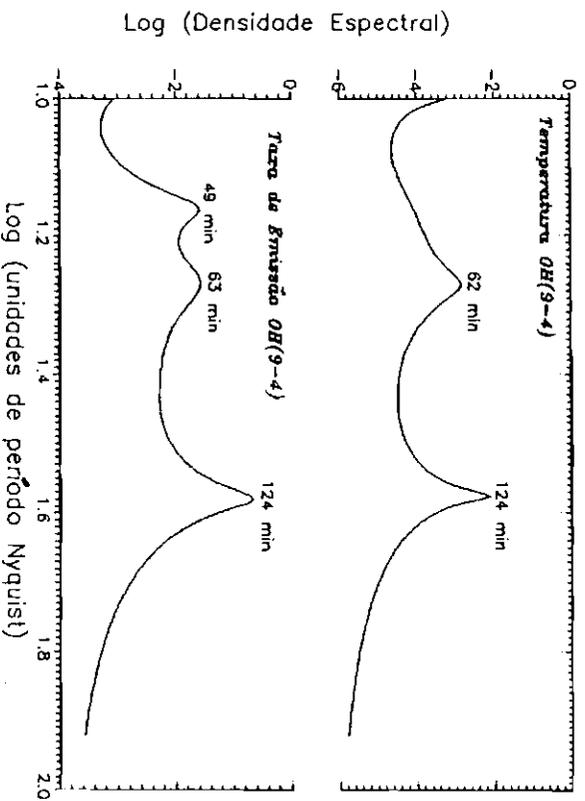


Fig. 6.26 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^*(9-4)$ na noite de 23/24 de junho de 1990.

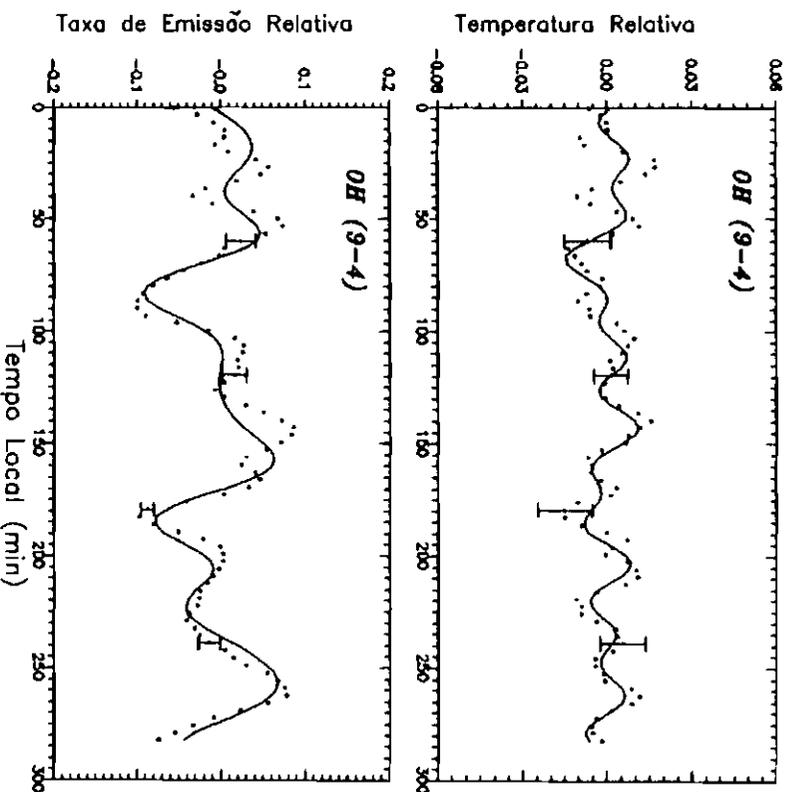


Fig. 6.27 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^*(9-4)$ na noite de 23/24 de junho de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

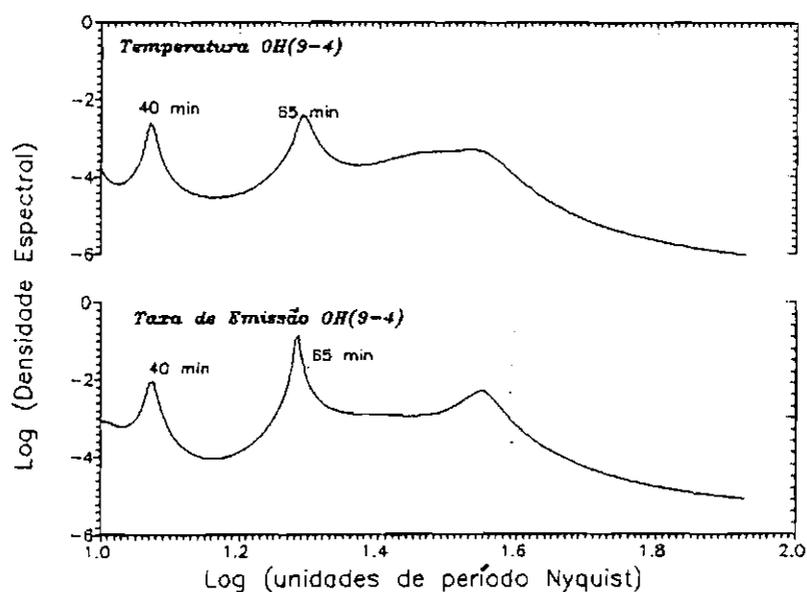


Fig. 6.28 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^+(9-4)$ na noite de 20/21 de novembro de 1990.

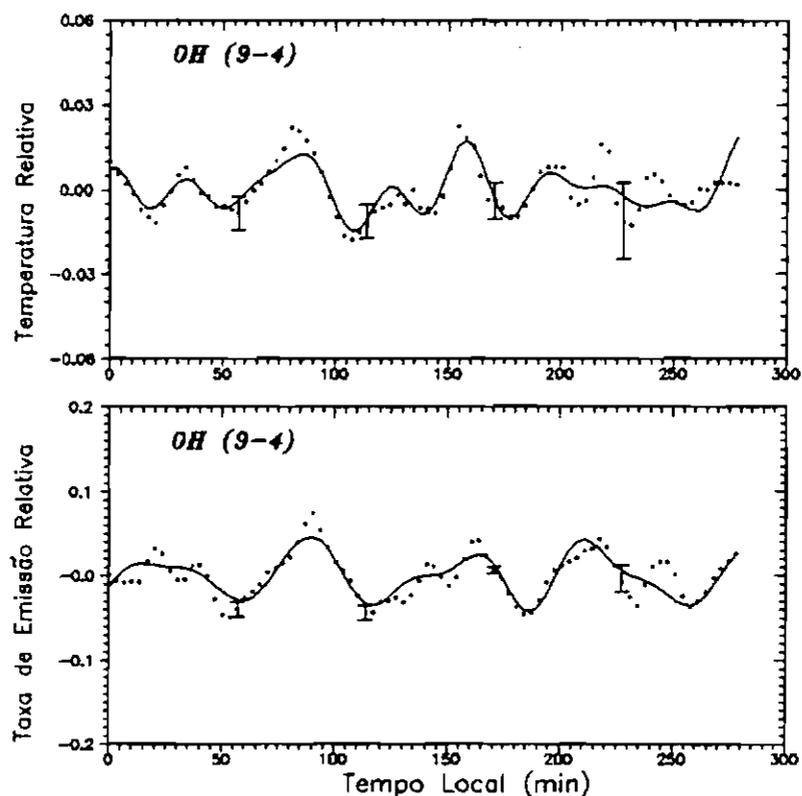


Fig. 6.29 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^+(9-4)$ na noite de 20/21 de novembro de 1990. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

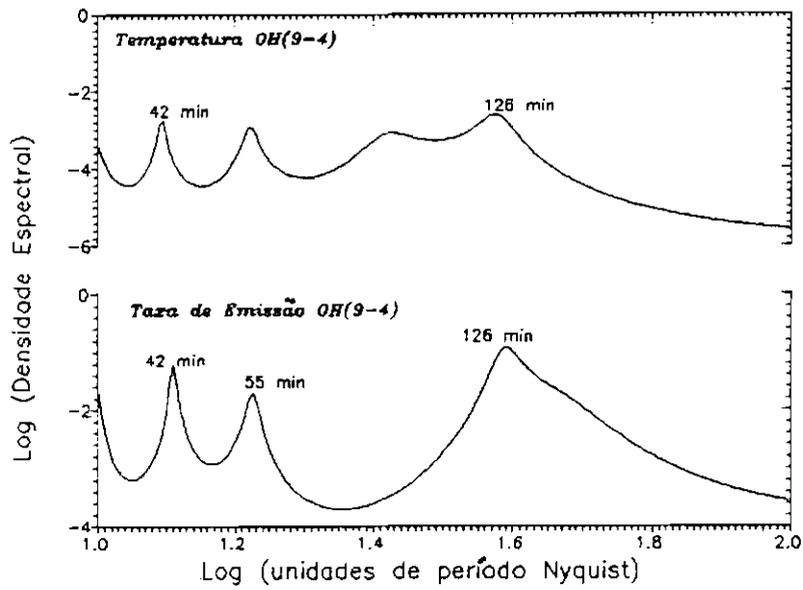


Fig. 6.30 - O espectro de potência da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^*(9-4)$ na noite de 17/18 de abril de 1991.

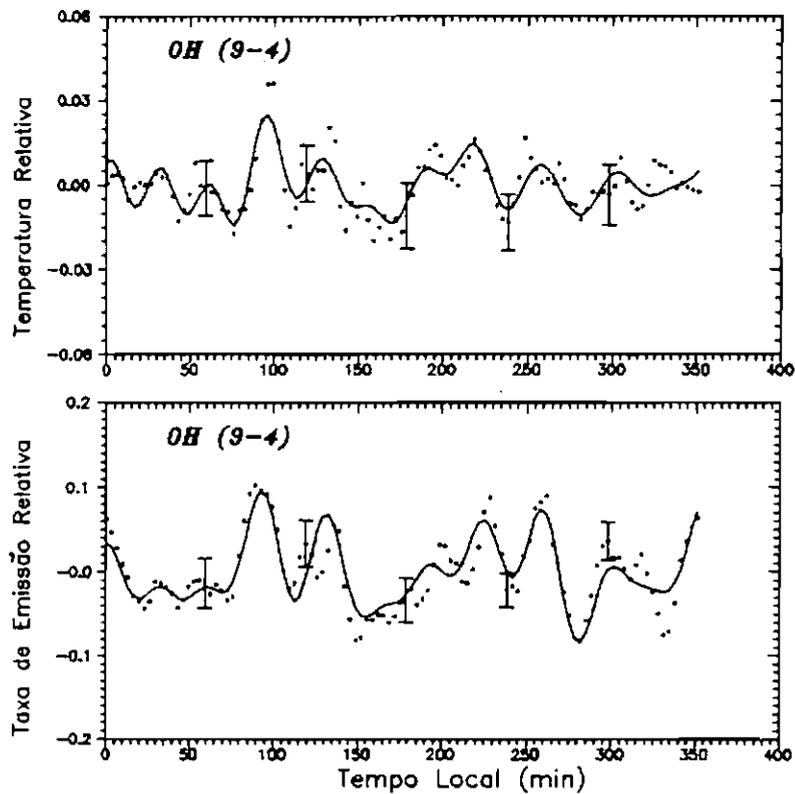


Fig. 6.31 - Curva de ajuste (linha sólida) sobreposta aos valores observados da taxa de emissão relativa e temperatura relativa de $\text{OH}^*(9-4)$ na noite de 17/18 de abril de 1991. As barras de erro referem-se à propagação do erro aleatório a partir das medidas originais.

A Tabela 6.3 mostra, para a emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, os períodos das ondas e os valores correspondentes de η medidos (usando a equação 6.20). Os doze eventos com ondas quase-monocromáticas analisados possuem períodos compreendidos entre 42 min e 2,3 horas, sendo que o período de onda mais comum está em torno de 1,5 horas. A Tabela 6.3 mostra também que os valores de $|\eta|$ variam sobre uma faixa de 1,5 a 6,4, e os valores de Φ são positivos e menores do que 90° , na maior parte dos casos.

TABELA 6.3 - VALORES DE η PROVENIENTES DAS MEDIDAS DE $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$

Data	Período (min)	$ \eta $	$\Phi (^\circ)$
23/24 de abril (1990)	81	$2,2 \pm 0,2$	31 ± 6
25/26 de abril (1990)	42	$1,5 \pm 0,3$	-71 ± 12
	63	$1,8 \pm 0,3$	2 ± 7
23/24 de maio (1990)	86	$3,6 \pm 0,5$	25 ± 9
26/27 de maio (1990)	142	$5,6 \pm 0,8$	1 ± 8
21/22 de junho (1990)	97	$5,8 \pm 0,4$	-5 ± 4
24/25 de junho (1990)	73	$5,0 \pm 0,5$	12 ± 5
	132	$6,4 \pm 0,5$	28 ± 5
16/17 de setembro (1990)	103	$3,6 \pm 0,5$	80 ± 10
14/15 de novembro (1990)	108	$4,5 \pm 0,4$	1 ± 4
21/22 de novembro (1990)	45	$4,8 \pm 0,9$	-20 ± 11
	107	$5,3 \pm 0,7$	10 ± 8

A Tabela 6.4 exibe, para a emissão de $\text{OH}^*(9-4)$, os períodos das ondas e os valores correspondentes de η medidos (usando a equação 6.20). Os eventos com oito ondas quase-monocromáticas analisados possuem os períodos entre 40 min e 2 horas. A Tabela 6.3 mostra também que os valores de $|\eta|$ variam sobre uma faixa de 2,1 a 6,9, e os valores de Φ estão entre -90° e 90° .

TABELA 6.4 - VALORES DE η PROVENIENTES DAS MEDIDAS DE $\text{OH}^*(9-4)$

Data	Período (min)	$ \eta $	$\Phi (^\circ)$
29/30 de janeiro (1990)	41	$3,8 \pm 2,0$	-35 ± 17
21/22 de junho (1990)	89	$4,3 \pm 0,6$	88 ± 23
23/24 de junho (1990)	63	$5,8 \pm 1,3$	-6 ± 14
	124	$6,9 \pm 1,5$	10 ± 13
20/21 de novembro (1990)	40	$2,1 \pm 0,5$	58 ± 13
	65	$4,7 \pm 0,7$	34 ± 9
17/18 de abril (1991)	42	$6,0 \pm 1,2$	-57 ± 12
	126	$5,9 \pm 1,0$	-6 ± 10

CAPÍTULO 7

TEORIA DA RELAÇÃO ENTRE AS
ONDAS DE GRAVIDADE E O AIR-
GLOW DE $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$

O estudo da relação entre as ondas de gravidade e as oscilações observadas na temperatura rotacional e na taxa de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, tem-se apoiado na modelagem do parâmetro η , porque além de relacionar de forma explícita essas duas grandezas, independentemente da amplitude de oscilação da onda, ele pode ser determinado experimentalmente.

Um modelo inicial para calcular a razão de Krassovsky η , proposto por Walterscheid *et al.* (1987), empregou a dinâmica das ondas de gravidade-acústica linearizadas na descrição *euleriana* (ou espacial) para perturbar o equilíbrio químico das cinco espécies minoritárias O, O₃, H, OH e HO₂ que controla a densidade de OH^* . Concluiu-se que η é uma quantidade complexa, sensível à altitude da camada de emissão de OH^* , bem como ao período de onda e comprimento de onda horizontal (λ_x). Na mesma linha, os trabalhos de Hickey (1988a, b) consideraram a presença das difusividades *eddy* na dinâmica das ondas de gravidade e encontraram uma influência considerável nos valores do parâmetro η em períodos de onda longos (ou equivalentemente, em comprimentos de onda vertical curtos). Paralelamente, Schubert e Walterscheid (1988) modificaram o modelo original de Walterscheid *et al.* (1987) para introduzir os efeitos de uma extensão vertical não nula da camada de emissão de OH^* . Esta modificação é especialmente importante às ondas que apresentam comprimentos de onda (vertical) menor do que ou comparáveis à espessura da camada de emissão, desde que as emissões provenientes de diferentes níveis de altitude na camada podem estar defasadas entre si, extinguindo-se mutuamente (efeitos de interferência). A constatação de que ambos os efeitos de dissipação e de interferência tornam-se importantes em comprimentos de onda vertical curtos, levaram Schubert *et al.* (1991) a estudá-los simultaneamente. Um dos resultados interessantes revelados em tal estudo diz respeito aos resultados hipotéticos obtidos para o parâmetro η caso o limite superior, tomado para as integrações verticais, não fosse suficientemente elevado, a fim de garantir que todas as variáveis de perturbação relacionadas à taxa de emissão fossem próximas a zero nesta altitude.

O modelo desenvolvido neste trabalho estende essencialmente os resultados alcançados pelo modelo químico/dinâmico de Schubert *et al.* (1991) ao *air-glow* de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$. O presente modelo incorpora um esquema fotoquímico de cinco reações (envolvendo as espécies minoritárias O, H, O_3 e OH) para descrever os mecanismos de produção e perda de OH^* (9-4) e um esquema fotoquímico de seis reações (envolvendo o oxigênio atômico), no caso do mecanismo de excitação de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$. O oxigênio e o nitrogênio molecular compõem o gás majoritário básico, e a relação de mistura entre o gás majoritário e o oxigênio molecular é suposta constante. O formalismo para calcular o parâmetro η usa a equação de continuidade linearizada para cada constituinte minoritário em termos da temperatura relativa perturbada — assumindo que cada espécie tenha a mesma temperatura e velocidade impostas pelo gás majoritário — e as equações da dinâmica que relacionam as perturbações na densidade atmosférica, velocidade e pressão em função da temperatura relativa perturbada, de acordo com a teoria das ondas de gravidade-acústica. O modelo mesosférico de Rodrigo *et al.* (1991) é adotado para o estado básico das espécies minoritárias. Os efeitos da difusividade de momentum *eddy* e difusividade térmica *eddy* são tratados analogamente aos da viscosidade molecular e difusividade térmica molecular, usando a coordenada z altitude ao invés da coordenada z log-pressão, utilizada na descrição de Schubert *et al.* (1991) — os resultados são praticamente os mesmos. A seguir descreve-se com detalhes a metodologia usada neste trabalho para calcular o parâmetro η .

7.1 - RELAÇÕES DE DISPERSÃO E POLARIZAÇÃO PARA AS ONDAS DE GRAVIDADE PLANAS

A teoria da propagação das ondas de gravidade será desenvolvida considerando uma atmosfera neutra, estacionária na temperatura e composição, e com difusividade de momentum e térmica *eddy*. A técnica tradicional da teoria da perturbação em primeira ordem é utilizada. As quantidades perturbadas são ondas planas que se propagam no plano x - z (x é a coordenada horizontal). Considere, inicialmente, as seguintes hipóteses básicas:

- 1) negligencia-se a curvatura da Terra;
- 2) o termo de Coriolis é desprezado;
- 3) a aceleração da gravidade é constante;
- 4) a equação dos gases perfeitos é válida;
- 5) as forças dissipativas são parametrizadas pelo termo *eddy*.

Nestas condições, as equações fundamentais de momentum, energia, continuidade e de estado, que governam o fluido atmosférico, por unidade de massa, são dadas por (Kato, 1980):

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \mathbf{g} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\phi}}, \quad (7.1)$$

$$\frac{Dp}{Dt} - C^2 \frac{D\rho}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\varphi}, \quad (7.2)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (7.3)$$

$$p = r \rho T, \quad (7.4)$$

onde os símbolos utilizados aqui são definidos logo abaixo:

$\mathbf{x} = (x, 0, z)$ coordenadas cartesianas (cm);

$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$ é o operador derivada de Stokes (s^{-1});

$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}$ operador diferencial nas coordenadas cartesianas (cm^{-1});

$\mathbf{v} = (u, 0, w)$ velocidade do fluido (cms^{-1});

$\mathbf{g} = (0, 0, -g)$ aceleração da gravidade (cms^{-2});

ρ densidade numérica do ar atmosférico (cm^{-3});

p pressão por unidade de massa ($cm^{-1}s^{-2}$);

T temperatura cinética do fluido (K);

$C = \sqrt{\gamma r T}$ velocidade do som no fluido (cms^{-1});

γ razão entre as capacidades térmicas a pressão e temperatura constantes;

r quociente entre a constante dos gases perfeitos e o peso molecular médio da atmosfera ($cm^2 s^{-2} K^{-1}$);

$\bar{\boldsymbol{\phi}} = \rho \nu \nabla \mathbf{v}$ tensor fluxo de momentum eddy ($cm^{-1}s^{-2}$);

$\boldsymbol{\varphi} = r \rho \kappa \nabla T$ vetor fluxo térmico eddy (s^{-3});

ν viscosidade cinemática eddy ($cm^2 s^{-1}$);

κ difusividade térmica eddy ($cm^2 s^{-1}$).

A teoria matemática da perturbação em primeira ordem é conveniente para tratar tal atmosfera (estado básico + perturbado), desde que a quantidade genérica Λ seja tal que,

$$\Lambda = \Lambda_0 + \epsilon \Lambda' + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad \text{para } \epsilon \ll 1.$$

Considerando então as hipóteses mais restritivas, com relação ao estado básico da atmosfera,¹⁴

$$T = T_0 + T', \quad \text{tal que } T_0 = \text{constante.} \quad (7.5)$$

$$\mathbf{v} = (u_0, 0, 0) + (u', 0, w'), \quad \text{tal que } u_0 = \text{constante,} \quad (7.6)$$

as equações fundamentais (7.1) - (7.4) tornam-se:

Ordem-0:

$$\begin{cases} u_0 \left(\frac{\partial \rho_0}{\partial z} - C_0^2 \frac{\partial \rho_0}{\partial z} \right) = 0 \\ \rho_0 g + \frac{\partial p_0}{\partial z} = 0 \\ p_0 = r \rho_0 T_0, \end{cases} \quad (7.7)$$

Ordem-1:

$$\begin{cases} \rho_0 \frac{D_0}{Dt} u' = -\frac{\partial p'}{\partial x} + (\nabla \cdot \bar{\phi})_x \\ \rho_0 \frac{D_0}{Dt} w' = -\rho' g - \frac{\partial p'}{\partial z} + (\nabla \cdot \bar{\phi})_z \\ \frac{D_0}{Dt} p' + w' \frac{\partial \rho_0}{\partial z} - C_0^2 \left(\frac{D_0}{Dt} \rho' + w' \frac{\partial \rho_0}{\partial z} \right) = \nabla \cdot \varphi \\ \frac{D_0}{Dt} \rho' + \rho_0 \nabla \cdot \mathbf{v}' = 0 \\ \frac{p'}{\rho_0} = \frac{p'}{\rho_0} + \frac{T'}{T_0}, \end{cases} \quad (7.8)$$

onde,

$$\begin{aligned} C_0^2 &= \gamma r T_0 \\ \frac{D_0}{Dt} &= \frac{\partial}{\partial t} + u_0 \frac{\partial}{\partial x} \\ (\nabla \cdot \bar{\phi})_x &= \nu \left(\rho_0 \nabla^2 u' + \frac{\partial \rho_0}{\partial z} \frac{\partial u'}{\partial z} \right) \\ (\nabla \cdot \bar{\phi})_z &= \nu \left(\rho_0 \nabla^2 w' + \frac{\partial \rho_0}{\partial z} \frac{\partial w'}{\partial z} \right) \\ \nabla \cdot \varphi &= \kappa r \left(\rho_0 \nabla^2 T' + \frac{\partial \rho_0}{\partial z} \frac{\partial T'}{\partial z} \right). \end{aligned}$$

Supõem-se os valores de ν e κ constantes com a altura.¹⁵

A solução das equações de ordem-0 são bem conhecidas:

$$\begin{aligned} p_0 &= p_{00} e^{-z/H_0} \\ \rho_0 &= \rho_{00} e^{-z/H_0}, \end{aligned} \quad (7.9)$$

sendo p_{00} e ρ_{00} a densidade e pressão atmosféricas em $z = 0$ e $H_0 = r T_0 / g$ é a altura de escala em cm.

¹⁴A temperatura básica é quase constante com a altitude na região da mesopausa (Hedin, 1987). Uma relação mais geral foi desenvolvida por Hines e Tarasick (1987), levando em consideração a variação de T_0 com a altitude. Pequena alteração nos resultados finais foi obtida, exceto quando os fenômenos de reflexão são relevantes.

¹⁵A difusividade de momento é relativamente constante com a altitude entre 75 e 100 km, com valores variando de aproximadamente 50 e 200 m² s⁻¹; no entanto, entre 100 e 120 km, ela cresce rapidamente com a altura, alcançando valores de até 10³ m² s⁻¹ em 120 km (Garcia e Solomon, 1985).

As equações de ordem-1, com um pouco de álgebra, podem ser colocadas na forma:

$$\frac{D_o}{Dt} u' = -r T_o \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p'}{\rho_o} \right) + \nu \nabla^2 u' - \frac{\nu g}{r T_o} \frac{\partial u'}{\partial z}, \quad (7.10)$$

$$\frac{D_o}{Dt} w' = -g \left(\frac{\rho'}{\rho_o} - \frac{p'}{\rho_o} \right) - r T_o \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{p'}{\rho_o} \right) + \nu \nabla^2 w' - \frac{\nu g}{r T_o} \frac{\partial w'}{\partial z}, \quad (7.11)$$

$$\frac{D_o}{Dt} \left(\frac{p'}{\rho_o} \right) + \gamma \nabla \cdot \mathbf{v}' - \frac{w' g}{r T_o} = \kappa \nabla^2 \left(\frac{T'}{T_o} \right) - \frac{\kappa g}{r T_o} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{T'}{T_o} \right), \quad (7.12)$$

$$\frac{D_o}{Dt} \left(\frac{\rho'}{\rho_o} \right) + \nabla \cdot \mathbf{v}' - \frac{w' g}{r T_o} = 0 \quad (7.13)$$

$$\frac{p'}{\rho_o} = \frac{\rho'}{\rho_o} + \frac{T'}{T_o}. \quad (7.14)$$

As soluções ondulatórias do conjunto de equações (7.10)–(7.14) podem ser achadas via forma complexa de Fourier (Lindzen *et al.*, 1990), tal que

$$\left(\mathbf{v}', \frac{\rho'}{\rho_o}, \frac{p'}{\rho_o}, \frac{T'}{T_o} \right) = \Re \left\{ (\hat{\mathbf{v}}, \hat{\rho}, \hat{p}, \hat{T}) e^{-i(\mathbf{m} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} \right\}, \quad (7.15)$$

onde $\mathbf{m} = (m_x, 0, m_z)$ é vetor número de onda complexo (cm^{-1}), ω é a frequência da onda (rads^{-1}) e $\hat{\mathbf{v}}, \hat{\rho}, \hat{p}$ e \hat{T} são amplitudes complexas. Supondo que não há variações de amplitude na direção horizontal (Beer, 1975), ou seja,

$$m_x = \Re\{m_x\} + i0 \quad \Rightarrow \quad m_x \equiv k_x, \quad \text{para } k_x \text{ real.}$$

então,

$$\begin{aligned} e^{-i(\mathbf{m} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} &= e^{-i(\Re\{m_z\}z + i\Im\{m_z\}z + k_x x - \omega t)} \\ &= e^{-i((k_z + i\alpha)z + k_x x - \omega t)}, \end{aligned}$$

onde foram definidas as seguintes quantidades reais

$$\Re\{m_z\} = k_z,$$

$$\Im\{m_z\} = \alpha.$$

Assim, o fator complexo pode ser definido em termos de quantidades reais,

$$e^{-i(\mathbf{m} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} = e^{\alpha z} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}, \quad (7.16)$$

onde $\mathbf{k} = (k_x, 0, k_z)$ é o vetor número de onda real (cm^{-1}) e α o fator de atenuação ou crescimento da amplitude da onda.

Então, impondo essas soluções sinusoidais harmônicas às equações linearizadas nas variáveis perturbadas, resulta (na forma matricial),

$$\begin{bmatrix} i\Omega + \nu [k_x^2 - (\alpha - ik_z)^2] + \frac{\nu}{H_0}(\alpha - ik_z) & 0 & -ik_x g H_0 \\ 0 & i\Omega + \nu [k_x^2 - (\alpha - ik_z)^2] + \frac{\nu}{H_0}(\alpha - ik_z) & g H_0 (\alpha - ik_z) - g \\ -ik_x \gamma & \gamma(\alpha - ik_z) - \frac{1}{H_0} & i\Omega \\ -ik_x & (\alpha - ik_z) - \frac{1}{H_0} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \\ g & 0 & \\ 0 & \kappa [k_x^2 - (\alpha - ik_z)^2] + \frac{\kappa}{H_0}(\alpha - ik_z) & \\ i\Omega & 0 & \\ -1 & -1 & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \hat{w} \\ \hat{p} \\ \hat{\rho} \\ \hat{T} \end{bmatrix} = 0. \quad (7.17)$$

onde $\Omega = \omega - u_0 k_x$ é a frequência angular de deslocamento Doppler (*Doppler-shifted*), também chamada de frequência intrínseca da onda.

A equação (7.17) é um sistema linear homogêneo, cuja solução não-trivial requer que o determinante da matriz coeficiente seja nulo:

$$\begin{vmatrix} i\Omega + \nu\delta^2 & 0 & -ik_x g H_0 & 0 & 0 \\ 0 & i\Omega + \nu\delta^2 & g H_0 (\beta - \frac{1}{H_0}) & g & 0 \\ -ik_x \gamma & \gamma\beta - \frac{1}{H_0} & i\Omega & 0 & \kappa\delta^2 \\ -ik_x & \beta - \frac{1}{H_0} & 0 & i\Omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1 \end{vmatrix} = 0, \quad (7.18)$$

onde, por conveniência, foram definidos os parâmetros complexos β e δ^2 :

$$\beta = \alpha - ik_z \quad (\text{cm}^{-1}), \quad (7.19)$$

$$\delta^2 = \xi^2 + i\zeta^2 \quad (\text{cm}^{-2}), \quad (7.20)$$

sendo,

$$(\xi^2, \zeta^2) = \left(k^2 - \alpha^2 + \frac{\alpha}{H_0}, k_z(2\alpha - \frac{1}{H_0}) \right) \quad (\text{cm}^{-2}). \quad (7.21)$$

Resolvendo-se o determinante da equação (7.18), resulta a relação de dispersão complexa:

$$(\nu\delta^2 + i\Omega)^2 (\Omega^2 - i\Omega\kappa\delta^2) - g H_0 (\nu\delta^2 + i\Omega) (\kappa\delta^2 + i\gamma\Omega)\delta^2 - k_x^2 g^2 (\gamma - 1) = 0. \quad (7.22)$$

A solução assintótica ($\nu, \kappa \rightarrow 0$) da relação de dispersão (7.22) é dada por:

$$\delta_{\nu, \kappa \rightarrow 0}^2 = \frac{\Omega^2 + (\gamma - 1)(k_x g / \Omega)^2}{g H_0 \gamma} \quad (7.23)$$

ou, separando nas partes imaginária e real,

$$\begin{cases} \zeta^2 = 0 \\ \Omega^2 + k_x^2 g^2 (\gamma - 1) - g H_0 \gamma \Omega^2 \xi^2 = 0. \end{cases} \quad (7.24)$$

A equação (7.24) fornece duas soluções possíveis para as ondas de gravidade:

$$k_z = 0 \quad (\text{ondas externas, que inclui o modo evanescente}), \quad (7.25)$$

$$\alpha = \frac{1}{2H_0} \quad (\text{ondas internas}), \quad (7.26)$$

A segunda alternativa permite uma componente vertical de propagação, e as ondas associadas a esta solução são conhecidas como ondas de gravidade-acústica internas (Hines, 1960). Especialmente estas ondas serão tratadas neste trabalho. Assim, da equação (7.24) tem-se:

$$k_z^2 = k_x^2 \left(\frac{\omega_B^2}{\Omega^2} - 1 \right) + \frac{\Omega^2 - \omega_a^2}{C_0^2}, \quad (7.27)$$

sendo $\omega_B^2 = \frac{\gamma-1}{\gamma} g/H_0$ e $\omega_a^2 = \gamma g/4H_0$ as duas frequências de corte Brunt Väisälä e acústica, respectivamente.

Voltando ao caso mais geral, depois de alguma manipulação algébrica efetuada sobre a relação de dispersão (7.22), segue-se uma equação cúbica em δ^2 :

$$c_3 (\delta^2)^3 + c_2 (\delta^2)^2 + c_1 \delta^2 + c_0 = 0. \quad (7.28)$$

onde,

$$\begin{cases} c_3 = -gH_0\kappa\nu - i\Omega\nu^2\kappa \\ c_2 = \Omega^2\nu(\nu + 2\kappa) - igH_0\Omega(\kappa + \nu\gamma) \\ c_1 = gH_0\Omega^2\gamma + i\Omega^3(\kappa + 2\nu) \\ c_0 = -k_x^2g^2(\gamma - 1) - \Omega^4. \end{cases}$$

Separando em partes real e imaginária,

$$\Re(7.28): \quad (\xi^6 - 3\xi^2\zeta^4)\Re\{c_3\} - (3\xi^4\zeta^2 - \zeta^6)\Im\{c_3\} + (\xi^4 - \zeta^4)\Re\{c_2\} + \\ - 2\xi^2\zeta^2\Im\{c_2\} + \xi^2\Re\{c_1\} - \zeta^2\Im\{c_1\} + \Re\{c_0\} = 0$$

$$\Im(7.28): \quad (\xi^6 - 3\xi^2\zeta^4)\Im\{c_3\} + (3\xi^4\zeta^2 - \zeta^6)\Re\{c_3\} + (\xi^4 - \zeta^4)\Im\{c_2\} + \\ 2\xi^2\zeta^2\Re\{c_2\} + \xi^2\Im\{c_1\} + \zeta^2\Re\{c_1\} + \Im\{c_0\} = 0,$$

pode-se resolver numericamente a equação (7.28) calculando ξ^2 e ζ^2 de modo iterativo pelo algoritmo de Newton-Raphson para um sistema de equações não-lineares (Ortega e Rheinboldt, 1970). Assim, os valores de α e k_z podem finalmente ser obtidos via manipulação algébrica da equação de definição (7.21).

A Figura 7.1 exibe o comportamento do comprimento de onda vertical, $\lambda_z = 2\pi/k_z$, com o período da onda, $2\pi/\Omega$, para diversos comprimentos de onda horizontal, $\lambda_x = 200, 500, 1000, 1500$ e 2000 km calculado para uma atmosfera com e sem efeitos difusivos. Considerando a altitude de 90 km (altura representativa da região da mesopausa), a viscosidade cinemática *eddy* (ν) usada foi de $200 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ e o

número de Prandtl, $Pr = \nu/\kappa$, de 2 (Hocking, 1985). O modelo semi-empírico MSIS-86 (Hedin, 1987) fornece $H_0 = 5,60$ km e $\gamma = 1,403$. Todos os resultados que serão discutidos doravante, somente incluirão as ondas de gravidade internas com modos de propagação ascendentes, *i.e.*, as ondas geradas abaixo da camada de emissão ($k_z < 0$). Em particular, para $\lambda_x = 200$ km, e considerando o modelo de atmosfera básica aqui empregado, a transição do modo evanescente ao modo de propagação ocorre em 13,6 min, aproximadamente. Somente períodos maiores do que estes valores de transição serão abordados. A inclusão da difusividade *eddy* nas equações de momentum e energia revela-se importante em períodos de onda crescentes (ou, equivalentemente, em comprimentos de onda vertical curtos), conforme indica a Figura 7.1 (linhas tracejadas). A dissipação tende a limitar o decrescimento da magnitude do comprimento de onda vertical.

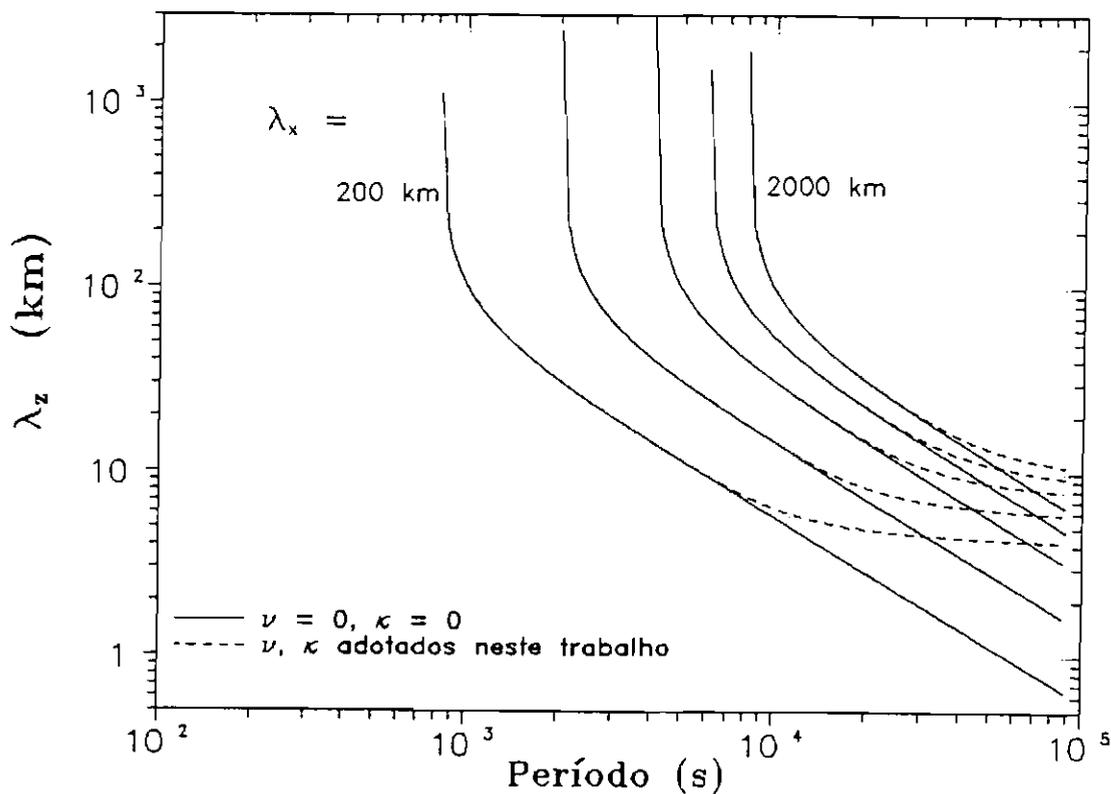


Fig. 7.1 - O comprimento de onda vertical *versus* período, calculado sem dissipação (linha cheia) e com dissipação (linha tracejada), para diferentes $\lambda_x = 200, 500, 1000, 1500$ e 2000 km, avaliado em 90 km.

Na ausência de efeitos dissipativos, a amplitude das oscilações nas variáveis de campo têm um comportamento proporcional ao fator de amplificação

$e^{z/2H_0}$ com a altitude crescente (Hines, 1960). A linha sólida na Figura 7.2 mostra o fator $1/2H_0$, que aparece na equação (7.26) — neste caso $\zeta^2 = 0$. A presença da difusividade *eddy* impede drasticamente este crescimento, sobretudo em períodos de onda maiores (> 2 horas). Para um determinado λ_x , pode-se definir uma frequência crítica de saturação tal que as ondas experimentam um crescimento nulo em amplitude. Por exemplo, para $\lambda_x = 200$ km, o período crítico é de aproximadamente 129 min. A partir deste valor, a amplitude das ondas torna-se decrescente com a altitude crescente, implicando em dissipação de energia na direção de propagação da onda — o valor absoluto do termo $\zeta^2/2k_z$ torna-se dominante sobre o fator $1/2H_0$ (vide equação 7.21). Desta figura, também percebe-se que este valor crítico ocorre em períodos de onda maiores para λ_x mais longos e que, para um dado período de onda, as ondas de λ_x mais longos sofrem menos dissipação do que ondas de λ_x mais curtos.

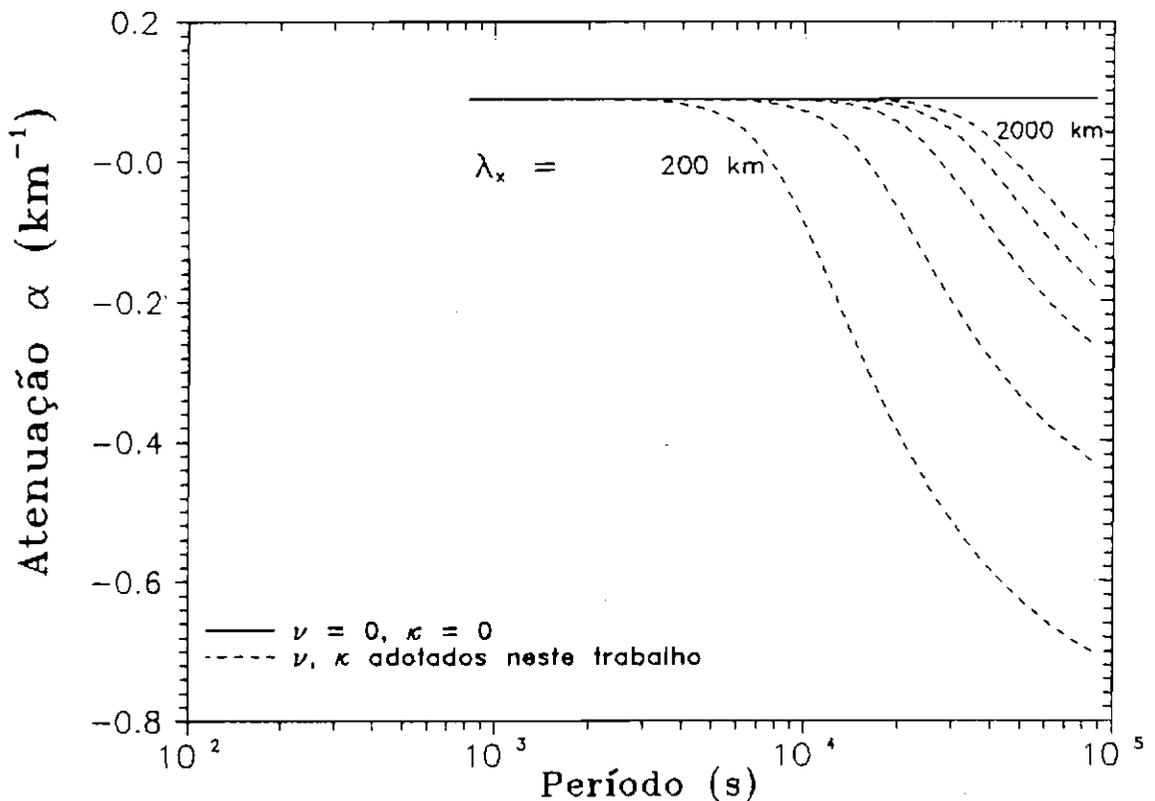


Fig. 7.2 - O fator de atenuação α versus período, calculado sem dissipação (linha cheia) e com dissipação (linha tracejada), para diferentes $\lambda_x = 200, 500, 1000, 1500$ e 2000 km, avaliado em 90 km. Quando $\nu, \kappa = 0$ $\alpha = 1/2H_0$.

Usando uma notação similar àquela de Walterscheid *et al.* (1987), as relações de polarização, que determinam as magnitudes e fases correspondentes a cada uma das variáveis atmosféricas, podem ser escritas como:

$$\widehat{\nabla} \cdot \mathbf{v} = f_1 \widehat{T}, \quad (7.29)$$

$$\widehat{w} = f_2 \widehat{T}, \quad (7.30)$$

$$\widehat{\rho} = f_3 \widehat{T}, \quad (7.31)$$

$$\widehat{p} = f_4 \widehat{T}, \quad (7.32)$$

$$\widehat{u} = f_5 \widehat{T}. \quad (7.33)$$

Os fatores f_1 , f_2 , f_3 , f_4 e f_5 são quantidades complexas e podem ser obtidos via resolução clássica do sistema linear homogêneo (7.17):

$$f_1 = \beta f_2 - ik_x f_5 \quad (s^{-1}), \quad (7.34)$$

$$f_2 = \frac{gk_x^2(i\Omega + \nu\delta^2)^{-1} - i\Omega(\beta - \frac{1}{H_0})}{\delta^2 + \frac{i\Omega}{gH_0}(i\Omega + \nu\delta^2)} \quad (\text{cm s}^{-1}), \quad (7.35)$$

$$f_3 = \frac{\delta^2 + \frac{1}{gH_0}(\beta - \frac{1}{H_0})}{\delta^2 + \frac{i\Omega}{gH_0}(i\Omega + \nu\delta^2)} \quad (\text{adim.}), \quad (7.36)$$

$$f_4 = 1 + f_3 \quad (\text{adim.}), \quad (7.37)$$

$$f_5 = \frac{ik_x g H_0}{(i\Omega + \nu\delta^2)} f_4 \quad (\text{cm s}^{-1}). \quad (7.38)$$

Os fatores de polarização f_1 , f_2 e f_3 em função do período de onda, para valores diferentes de λ_x (200, 500, 1000, 1500 e 2000 km), em uma atmosfera com ausência e presença de efeitos difusivos, são mostrados nas Figuras 7.3, 7.4 e 7.5, respectivamente. São grandezas de natureza complexa e, sendo assim, é mais conveniente representá-las na forma polar (ou trigonométrica), $f = |f| e^{i\phi}$, onde

$$|f| = \sqrt{(\Re\{f\})^2 + (\Im\{f\})^2} \quad (7.39)$$

é a magnitude de f e

$$\phi = \arctan\left(\frac{\Im\{f\}}{\Re\{f\}}\right), \quad -\pi \leq \phi \leq \pi \quad (7.40)$$

é a fase de f . Os fatores de polarização foram avaliados em uma altitude representativa da mesopausa (90 km).

Na ausência de dissipação a amplitude $|f_i|$ é independente do comprimento de onda horizontal, λ_x , e decresce linearmente com o período de onda, de

acordo com a seguinte expressão: $f_1 = -i\Omega/(\gamma - 1)$. Nestas condições f_1 é um número imaginário puro, tal que a fase ϕ_1 passa a ser constante e igual a -90° , independente de λ_x . Quando os efeitos difusivos são levados em consideração, $|f_1|$ é modificado e, para períodos de onda maiores, tende a um valor constante que dependerá de λ_x e do modelo de atmosfera neutra. Do mesmo modo, ϕ_1 é consideravelmente modificada, assumindo valores limites menores do que -90° com o período de onda crescente.

De um modo geral, a amplitude $|f_2|$ decresce com o período de onda crescente. Em períodos de onda maiores, os efeitos difusivos ($\nu, \kappa \neq 0$) limitam o decréscimo de $|f_2|$. A fase ϕ_2 é consideravelmente modificada com a inclusão da difusividade *eddy*. Em períodos de onda maiores, com $\nu = \kappa = 0$, ϕ_2 aproxima-se a -90° ; enquanto que, para $\nu, \kappa \neq 0$, ϕ_2 tende a valores assintóticos menores do que -90° , dependendo dos parâmetros atmosféricos e de λ_x .

A amplitude $|f_3|$ apresenta uma declividade acentuada em períodos de onda pequenos, tendendo para um valor constante com o período de onda crescente. Em geral, a amplitude $|f_3|$ é pouco afetada pela inclusão dos efeitos dissipativos. Quando estes acham-se presentes, o valor assintótico de $|f_3|$ dependerá dos parâmetros atmosféricos empregados aqui e da estrutura horizontal da onda (λ_x). A fase ϕ_3 também não é significativamente alterada pela presença da dissipação. Em períodos de onda longos, ϕ_3 tende a um valor constante próximo a -180° , ou seja, a densidade do ar perturbado tende a permanecer em antifase com a temperatura perturbada.

Os cálculos efetuados neste estudo abrangeram períodos de até 10^5 s ($\approx 27,8$ horas), valores estes excessivamente altos quando comparados aos períodos de onda realísticos das ondas de gravidade internas (geralmente menores do que 4 horas). Considerando as latitudes próximas ao equador geográfico, a força de Coriolis ainda pode ser negligenciada, exceto quando os comprimentos de onda (λ_x) envolvidos sejam superiores a 10 000 km.¹⁶ Porém, as ondas de períodos longos devem ser tratadas em termos da dinâmica da propagação de marés atmosféricas (Walterscheid e Schubert, 1987), exigindo uma modificação da teoria apresentada neste trabalho.

¹⁶Hickey (1988) concluiu que, em latitudes equatoriais, os efeitos difusivos na dinâmica das ondas de gravidade sobrepuseram-se aos efeitos devido à força de Coriolis, pelo menos para os comprimentos de onda (λ_x) inferiores a 10 000 km.

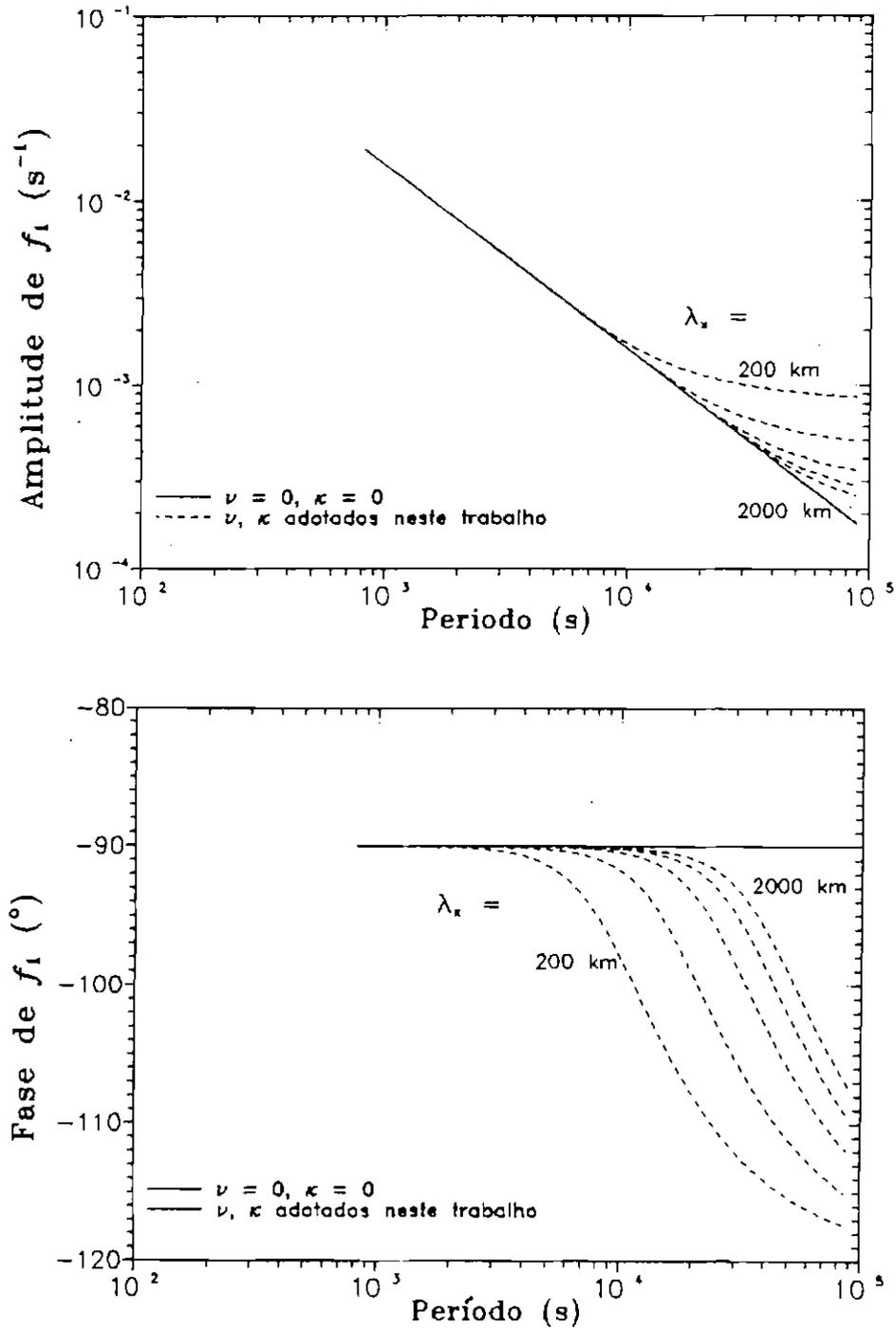


Fig. 7.3 - Magnitude e fase do fator de polarização f_1 versus período, calculado com dissipação *eddy* (linha tracejada) e sem dissipação *eddy* (linha sólida), para diferentes valores de $\lambda_x = 200, 500, 1000, 1500$ e 2000 km, avaliados em 90 km.

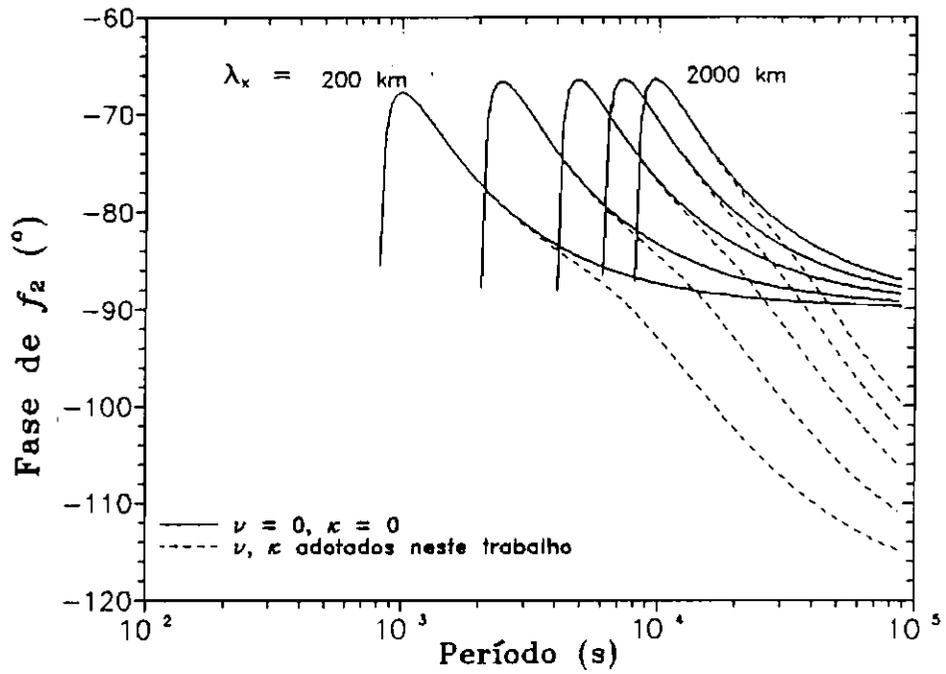
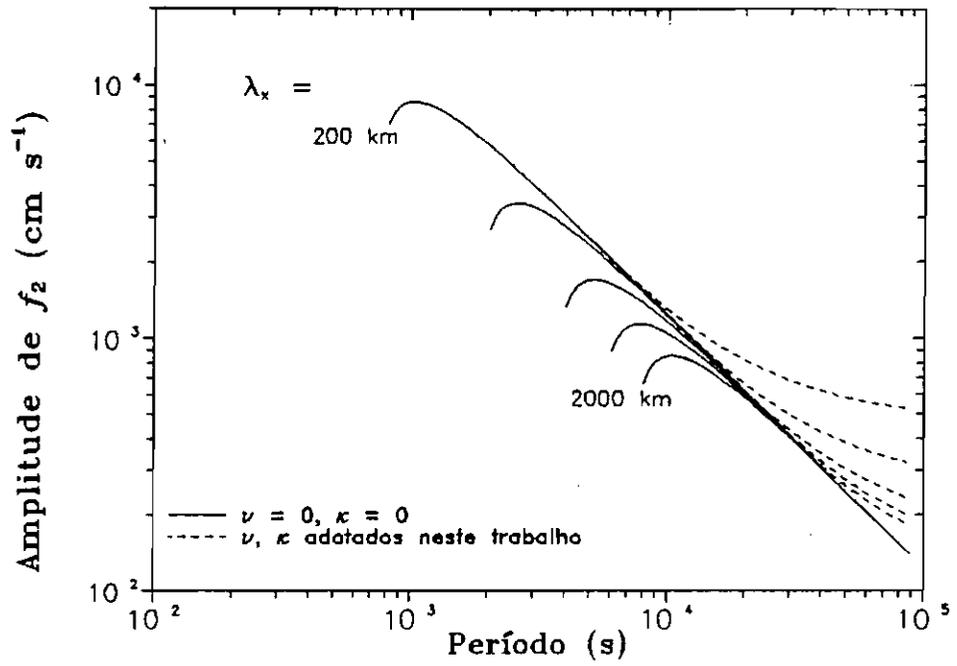


Fig. 7.4 - Idêntica à Figura 7.3, mas referida ao fator de polarização f_2 .

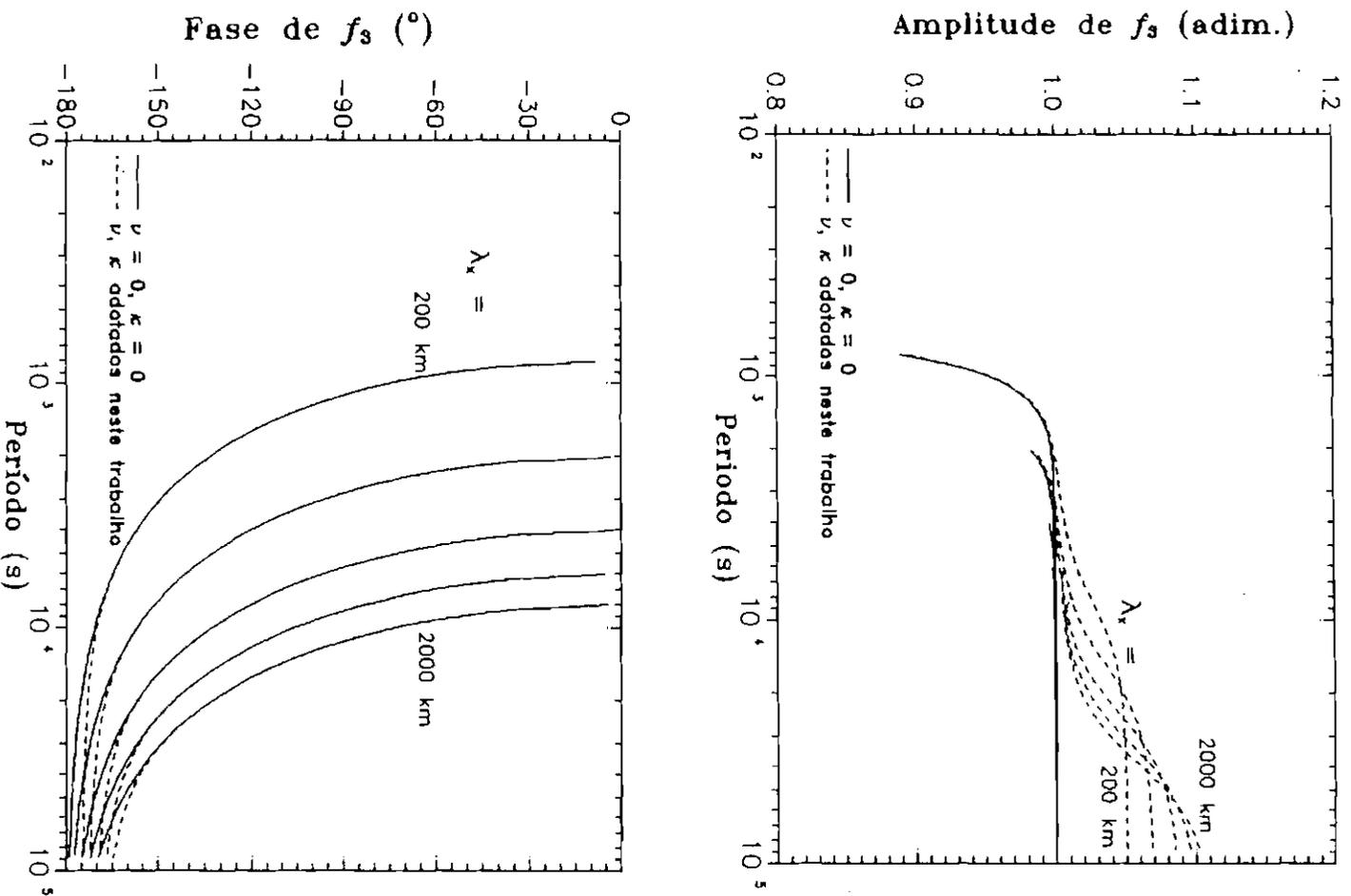


Fig. 7.5 - Idêntica à Figura 7.3, mas referida ao fator de polarização f_s .

7.2 - PERTURBAÇÕES ONDULATÓRIAS NA QUÍMICA DOS CONSTITUINTES MINORITÁRIOS

Frente à passagem de uma onda de gravidade, a massa específica da atmosfera, assim como a densidade numérica dos gases minoritários, são significativamente alteradas. Em geral, para estudar a interação das ondas de gravidade sobre as emissões de *airglow*, deve-se empreender uma análise em separado, distinguindo-se cada constituinte atmosférico que participa da cadeia de reações responsável pela produção das emissões, a fim de considerar as diferenças relativas entre os perfis de densidade, adicionando-se o fato de que muitas destas espécies (notadamente os constituintes minoritários) desviam-se do equilíbrio hidrostático, particularizando a resposta dinâmica de cada espécie.

A equação da continuidade para a espécie minoritária de densidade numérica n (cm^{-3}) é dada por:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (n \mathbf{v}) + P - L, \quad (7.41)$$

onde P representa o termo de produção fotoquímica da espécie em consideração, L o termo de perda fotoquímica, ambos em $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$, e $\nabla \cdot (n \mathbf{v})$ o termo de transporte.

Os termos de produção e perda fotoquímicas são geralmente proporcionais ao produto de um coeficiente cinético de reação e às concentrações das espécies reagentes. De forma geral, seguem as expressões:

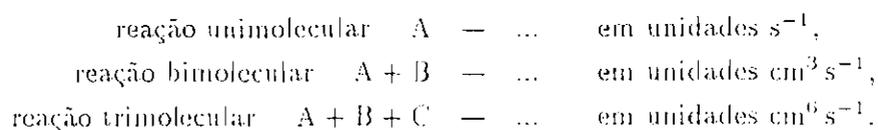
$$P = \sum_l P_l \quad P_l = k_l n(A)^{a_l} n(B)^{b_l} n(C)^{c_l}, \quad (7.42)$$

$$L = \sum_m L_m \quad L_m = k_m n(A)^{a_m} n(B)^{b_m} n(C)^{c_m}, \quad (7.43)$$

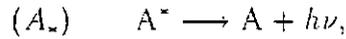
onde $l + m$ forma o sistema de reações fotoquímicas para a espécie n ; os coeficientes estequiométricos de reação, a , b e c , são definidos pela inequação geral:

$$0 \leq a + b + c \leq 3;$$

$n(A)$, ... é a concentração dos reagentes; e k representa o coeficiente cinético (taxa de reação) para uma dada reação fotoquímica:



Em uma reação unimolecular o reagente (A) degrada-se quimicamente ou energeticamente, tal que o coeficiente cinético independe das concentrações de outras espécies envolvidas. Os processos de reemissão de radiação (ou luminescência), como por exemplo o *airglow*, pertencem a esta categoria de reações. Para uma emissão de *airglow* da molécula excitada A^* ,



a lei de velocidade — ou, neste caso, a taxa volumétrica de emissão — é dada por $A_* n(A^*)$, onde $n(A^*)$ indica a concentração da espécie em questão e A_* é o coeficiente de Einstein (probabilidade intrínseca de transição) referente à transição óptica em particular.

As reações bimoleculares envolvem colisões binárias — a lei de velocidade é dada por $k n(A) n(B)$ —, enquanto que as reações trimoleculares são frequentemente processos de recombinação, envolvendo um terceiro corpo como agente catalizador — a lei de velocidade é expressa por $k n(A) n(B) n(C)$.

7.2.1 - Linearização do Coeficiente Cinético

Os coeficientes cinéticos de reação são, geralmente, funções da temperatura, $k(\mathbf{x}, t) = k(T(\mathbf{x}, t))$. Uma expansão em série de Taylor, em primeira ordem, fornece:

$$k(T(\mathbf{x}, t)) = k(T_0) + (T - T_0) \left. \frac{dk}{dT} \right|_{T=T_0}. \quad (7.44)$$

A forma da dependência de k com a temperatura nas reações bimoleculares é usualmente dada por:

$$k = k_{00} e^{-\theta_b/T}, \quad (7.45)$$

onde k_{00} é um fator multiplicativo em unidades $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ e θ_b é a energia de ativação multiplicada pela constante de Boltzmann; enquanto que nas reações trimoleculares,

$$k = k_{00} \left(\frac{T}{T_{00}} \right)^{-\theta_t}, \quad (7.46)$$

onde o fator multiplicativo k_{00} é medido em $\text{cm}^6 \text{s}^{-1}$, T_{00} é a temperatura nas condições de referência e θ_t é um expoente escolhido que depende essencialmente da natureza dos reagentes.

Assim, aplicando a equação (7.44) a ambos os casos, a perturbação em k pode ser colocada na forma geral:

$$\frac{k'}{k_0} = \theta \frac{T'}{T_0}, \quad (7.47)$$

sendo,

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{\theta_b}{T_0} && \text{para reações bimoleculares,} \\ \theta &= -\theta_t && \text{para reações trimoleculares.} \end{aligned}$$

7.2.2 - Linearização da Equação da Continuidade

O método da perturbação, em primeira ordem, aplicado à equação da continuidade (7.41) produz:

$$\begin{aligned} \text{ordem-0:} & \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (n_0) = \nabla \cdot (n_0 v_0) + P_0 - L_0 \\ \text{ordem-1:} \quad \frac{\partial}{\partial t} (n') = -\nabla \cdot (n_0 v') - \nabla \cdot (n' v_0) + P' - L' \end{array} \right. \end{aligned}$$

Considerando a hipótese (7.6) e a densidade básica $n_0 = n_0(z)$, depois de alguma manipulação algébrica resulta, para o estado básico e perturbado, respectivamente,

$$P_0 = L_0, \quad (7.48)$$

$$\frac{D_0}{Dt} \left(\frac{n'}{n_0} \right) = -\nabla \cdot v' - \frac{1}{n_0} \frac{dn_0}{dz} w' + \frac{1}{n_0} (P' - L'). \quad (7.49)$$

A equação (7.48) caracteriza a chamada aproximação de equilíbrio fotoquímico entre as espécies. Admitindo-se válida a solução sinusoidal (7.15) em n'/n_0 e assumindo que todas as espécies minoritárias têm a mesma temperatura e velocidade básicas impostas pelo ar atmosférico (gás majoritário),

$$i \Omega \hat{n} = -\widehat{\nabla \cdot v} + \frac{\hat{w}}{H_{n_0}} + \frac{1}{n_0} (\widehat{P - L}), \quad (7.50)$$

e, tendo em vista as relações de polarização para as ondas de gravidade (equações 7.29 - 7.38),

$$i \Omega \hat{n} = \left(\frac{f_2}{H_{n_0}} - f_1 \right) \hat{T} + \frac{1}{n_0} (\widehat{P - L}). \quad (7.51)$$

Aqui H_{n_0} representa a escala de altura da espécie minoritária de densidade n_0 :

$$\frac{1}{H_{n_0}} = -\frac{1}{n_0} \frac{dn_0}{dz}. \quad (7.52)$$

Para efetuar-se a linearização explícita dos termos de produção e perda, é necessário a definição de um modelo fotoquímico, desde que eles dependem particularmente do número e do tipo de reações envolvidas no processo de excitação das emissões de *airglow*. Contudo, tendo em vista que estes termos dependem de n , ρ (densidade do gás majoritário) e k , conforme atestam as equações (7.42) e (7.43), uma dependência funcional do tipo

$$Q = P - L, \quad \text{onde,} \quad (7.53)$$

$$\hat{Q} = \hat{Q}\left(\frac{\hat{n}}{\hat{T}}, \frac{\hat{\rho}}{\hat{T}}\right),$$

é perfeitamente aceitável, em conformidade com a equação (7.47). A quantidade Q representa o termo de fonte química. Assim, a definição de uma nova relação de polarização, para uma dada espécie de densidade numérica n , será útil para generalizar a equação (7.51):

$$\hat{n} = f_6 \hat{T}, \quad (7.54)$$

tal que,

$$f_6 = (i\Omega)^{-1} \left(\frac{f_2}{H_{n_0}} - f_1 + \frac{1}{n_0} \hat{Q}(f_6, f_3) \right). \quad (7.55)$$

Resumindo, para cada espécie minoritária de densidade numérica n , a equação de continuidade linearizada (simbolizada pela relação de polarização f_6) envolve um termo que representa as flutuações de densidade (impostas pelas ondas de gravidade) do gás majoritário (f_3); um termo de advecção devido às flutuações da velocidade vertical (f_2); um termo de compressão devido às flutuações da divergência de velocidade (f_1); e um termo que representa a química dos constituintes minoritários (Q).

7.3 - EXPRESSÃO ANALÍTICA PARA η

A taxa de emissão aparente (em Rayleigh) medida por um observador hipotético situado em solo pode ser expressa por:

$$B = S \int_0^\infty \mathcal{E} dr, \quad (7.56)$$

onde,

\mathcal{E} representa a taxa volumétrica de emissão (fótons $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$);

dr é o elemento de comprimento na direção de observação (cm);

S é uma constante de proporcionalidade que depende das características intrínsecas do fotômetro e do sistema de unidades empregado.

Quando o fotômetro encontra-se inclinado por um ângulo zenital ψ em relação à vertical (orientada para cima), no plano $x-z$ uma transformação de coordenadas leva a $(x+z \tan \psi, z)$ e o elemento dr torna-se $dr = dz \sec \psi$.¹⁷ Desde que a elevação do fotômetro não seja muito próxima ao solo (valores de ψ próximos a 90°), pode-se negligenciar a correção das medidas ao zênite. Neste trabalho tratar-se-á apenas o caso $dr = dz$.

A forma exata de \mathcal{E} depende dos detalhes da fotoquímica que produz uma determinada emissão de *airglow* (vide Capítulos 2 e 3), que por sua vez dependerá das seguintes quantidades:

- da densidade numérica do gás majoritário (ρ);
- da densidade das espécies ativas minoritárias (n);
- dos coeficientes cinéticos de reação (k).

A temperatura medida, T_m , é definida tomando-se o valor médio, ponderado por \mathcal{E} , da temperatura real ao longo da linha de visada¹⁸,

$$T_m = \frac{S \int_0^\infty \mathcal{E} T dz}{B}. \quad (7.57)$$

Inicialmente considere B , T_m e \mathcal{E} modificados pela presença da passagem de ondas de gravidade:

$$B = B_0 + B', \quad (7.58)$$

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{E}', \quad (7.59)$$

$$T_m = T_m^{(0)} + T_m'. \quad (7.60)$$

Seja

$$B_0 = S \int_0^\infty \mathcal{E}_0 dz, \quad (7.61)$$

$$B' = S \int_0^\infty \mathcal{E}' dz,$$

Então a perturbação fracional na taxa de emissão aparente é dada por:

$$\frac{B'}{B_0} = \frac{\int_0^\infty \mathcal{E}' dz}{\int_0^\infty \mathcal{E}_0 dz} \quad (7.62)$$

¹⁷Esta transformação de coordenadas deveria também ser empreendida nas equações fundamentais (7.1) a (7.4).

¹⁸Para uma prova detalhada de que a temperatura inferida das observações espectrofotométricas de solo é uma superposição, ponderada pela intensidade (taxa de emissão aparente), de várias camadas de temperaturas, consultar Schubert e Walterscheid, (1988).

Analogamente, a temperatura medida é expressa por,

$$\begin{aligned} T_m &= \frac{S \int_0^\infty (\mathcal{E}' + \mathcal{E}_o)(T_o + T') dz}{B_o + B'} \\ &= T_m^{(o)} + T_m', \end{aligned}$$

onde,

$$T_m^{(o)} = \frac{\int_0^\infty \mathcal{E}_o T_o dz}{\int_0^\infty \mathcal{E}_o dz}, \quad (7.63)$$

$$T_m' = T_m^{(o)} \left\{ \frac{\int_0^\infty \mathcal{E}_o T_o \left(\frac{T'}{T_o} + \frac{\mathcal{E}'}{\mathcal{E}_o} \right) dz}{\int_0^\infty \mathcal{E}_o T_o dz} - \frac{\int_0^\infty \mathcal{E}' dz}{\int_0^\infty \mathcal{E}_o dz} \right\}. \quad (7.64)$$

Supondo T_o aproximadamente constante na camada de emissão (equação 7.5),

$$\frac{T_m'}{T_m^{(o)}} = \frac{\int_0^\infty \mathcal{E}_o \left(\frac{T'}{T_o} \right) dz}{\int_0^\infty \mathcal{E}_o dz}. \quad (7.65)$$

As equações (7.62) e (7.64) fornecem uma expressão analítica para η :

$$\begin{aligned} \eta &= \left(\frac{B'}{B_o} \right) / \left(\frac{T_m'}{T_m^{(o)}} \right), \\ &= \frac{\int_0^\infty \mathcal{E}_o \frac{\mathcal{E}'}{\mathcal{E}_o} dz}{\int_0^\infty \mathcal{E}_o \frac{T'}{T_o} dz}, \end{aligned} \quad (7.66)$$

e a solução sinusoidal (7.15) permite calcular η em primeira ordem:

$$\eta = \frac{\int_0^\infty \mathcal{E}_o \chi e^{(\alpha - ik_z)z} dz}{\int_0^\infty \mathcal{E}_o e^{(\alpha - ik_z)z} dz}. \quad (7.67)$$

tal que,

$$\chi = \frac{\hat{\mathcal{E}}}{\hat{T}} \quad (7.68)$$

é um parâmetro de polarização associado ao mecanismo fotoquímico responsável pela produção das emissões de *airglow*. Caso o parâmetro de polarização χ seja independente da altitude z , então $\eta = \chi$. O passo seguinte consiste em estabelecer um modelo fotoquímico para as emissões $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^+(9-4)$, com o objetivo de calcular explicitamente a quantidade χ .

7.3.1 - Modelo Fotoquímico para o $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$

O conjunto de reações usado neste estudo encontra-se na Tabela 7.1. Este conjunto é essencialmente o mesmo esquema fotoquímico adotado nos trabalhos de McDade *et al.* (1986) e Murtagh *et al.* (1990).

O oxigênio atômico é a espécie química que controla o perfil de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$. Os termos de produção e perda para oxigênio atômico são obtidos aplicando-se as equações (7.42) e (7.43),

$$P = 0, \quad (7.69)$$

$$L = k_1 n(O)^2 n(M), \quad (7.70)$$

lembrando que à noite os mecanismos de fotodissociação inexistem. Desde que N_2 e O_2 são os constituintes majoritários da atmosfera, a densidade do terceiro corpo M (ar atmosférico) é aproximadamente igual a $n(O_2) + n(N_2) = \rho$.

TABELA 7.1 - REAÇÕES E COEFICIENTES CINÉTICOS RELATIVOS À EXCITAÇÃO DE $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$.

Reação	Coef.	Coef. Linearizado	θ	Referência
R1. $O + O + M \rightarrow O_2 + M$	k_1	$4.7 \times 10^{-33} \left(\frac{T_a}{300}\right)^{-2}$	-2	Campbell e Gray, 1973
$O + O + M \rightarrow O_2^* + M$	αk_1	(ver texto)	-2	
R2. $O_2^* + O_2 \rightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+) + O_2$	$\gamma k^{(2)}$	(ver texto)	--	
$O_2^* + M_i \rightarrow \dots$	$k^{(1)}$	(ver texto)	--	
R3. $O_2(b^1\Sigma_g^+) + M_i \rightarrow \dots$	$k_2^{(i)}$	$k_{2(i)}^{(1)} \leq 8 \times 10^{-14}$	0	Slanger e Black, 1979
		$k_{2(i)}^{(2)} = 4,0 \times 10^{-17}$	0	Martin <i>et al.</i> 1976
		$k_{2(i)}^{(3)} = 2,2 \times 10^{-15}$	0	Martin <i>et al.</i> 1976
R4. $O_2(b^1\Sigma_g^+) \rightarrow O_2 + h\nu (0-1)$	A_4	0.079	--	Vallance-Jones, 1974
R5. $O_2(b^1\Sigma_g^+) \rightarrow O_2 + h\nu_{(total)}$	A_5	0.083	--	Vallance-Jones, 1974
R6. $O_2^* \rightarrow O_2 + h\nu$	A_6	(ver texto)	--	

- Cálculo de f_6 :

O procedimento padrão de linearização para o termo de perda do oxigênio atômico produz:

$$L' = k_{1(i)} n_o(O)^2 \rho_o \left\{ \frac{2n'(O)}{n_o(O)} + \frac{\rho'}{\rho_o} + \frac{k_1'}{k_{1(i)}} \right\}.$$

Admitindo a solução sinusoidal (7.15),

$$\widehat{P-L} = -k_{1(O)} n_o(O)^2 \rho_o \{2n(\widehat{O}) + \widehat{\rho} + \theta \widehat{T}\},$$

onde $\theta = -2$, de acordo com a reação R1 (Tabela 7.1). Assim, escrevendo em termos das relações de polarização, o termo de fonte química, definido em (7.53) e (7.55), será dado por:

$$\widehat{Q} = -k_{1(O)} n_o(O)^2 \rho_o (2f_6(O) + f_3 - 2). \quad (7.71)$$

Finalmente, usando a equação (7.55), com o termo \widehat{Q} dado por (7.71), obtém-se:

$$f_6(O) = \frac{f_2/H_o(O) - f_1 - (f_3 - 2) k_{1(O)} \rho_o n_o(O)}{i\Omega + 2 k_{1(O)} n_o(O) \rho_o}, \quad (7.72)$$

onde $H_o(O)$ representa a escala de altura do oxigênio atômico.

O termo de fonte química \widehat{Q} é relativamente menor comparado aos outros termos na equação geral (7.55) (menor do que aproximadamente 1/1000), ou seja, o efeito dinâmico devido ao transporte vertical de O é preponderante sobre a química do oxigênio. Assim, negligenciando os efeitos difusivos nas equações (7.34) e (7.38), a equação (7.72) simplifica-se para

$$\begin{aligned} f_6(O) &= \frac{f_2}{H_o(O) i\Omega} + (\gamma - 1)^{-1} \\ &= \frac{H_o}{H_o(O)} f_3 + \left(1 - \frac{H_o}{H_o(O)}\right) (\gamma - 1)^{-1}. \end{aligned} \quad (7.73)$$

Caso $H_o = H_o(O)$, ou seja, a escala de altura fosse igual a escala de altura do gás majoritário, teríamos, obviamente, $f_6 = f_3$. Entretanto, abaixo de 99 km de altitude a escala de altura do oxigênio atômico é negativa, enquanto que H_o é sempre positiva (Hedin, 1987). Conseqüentemente, f_6 é muito diferente de f_3 . Demonstra-se, assim, a importância de levar em consideração a distribuição vertical das espécies minoritárias.

A amplitude e fase características da flutuação do oxigênio atômico em função do período intrínseco da onda ($2\pi/\Omega$), para dois valores distintos de λ_x (200 e 1500 km), na presença e ausência de dissipação atmosférica, são exibidas na Figura 7.6. A equação empregada no cálculo de $f_6(O)$ considera o termo de fonte química não-nulo. O fator de polarização $f_6(O)$ foi calculado no pico de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ (em torno de 95 km), empregando os seguintes valores para os constituintes (Hedin, 1987):

Constituinte:	n_o (cm ⁻³)	H_o (km)
O	$4,45 \times 10^{11}$	-14.15
M (O_2+N_2)	$3,28 \times 10^{13}$	5.66

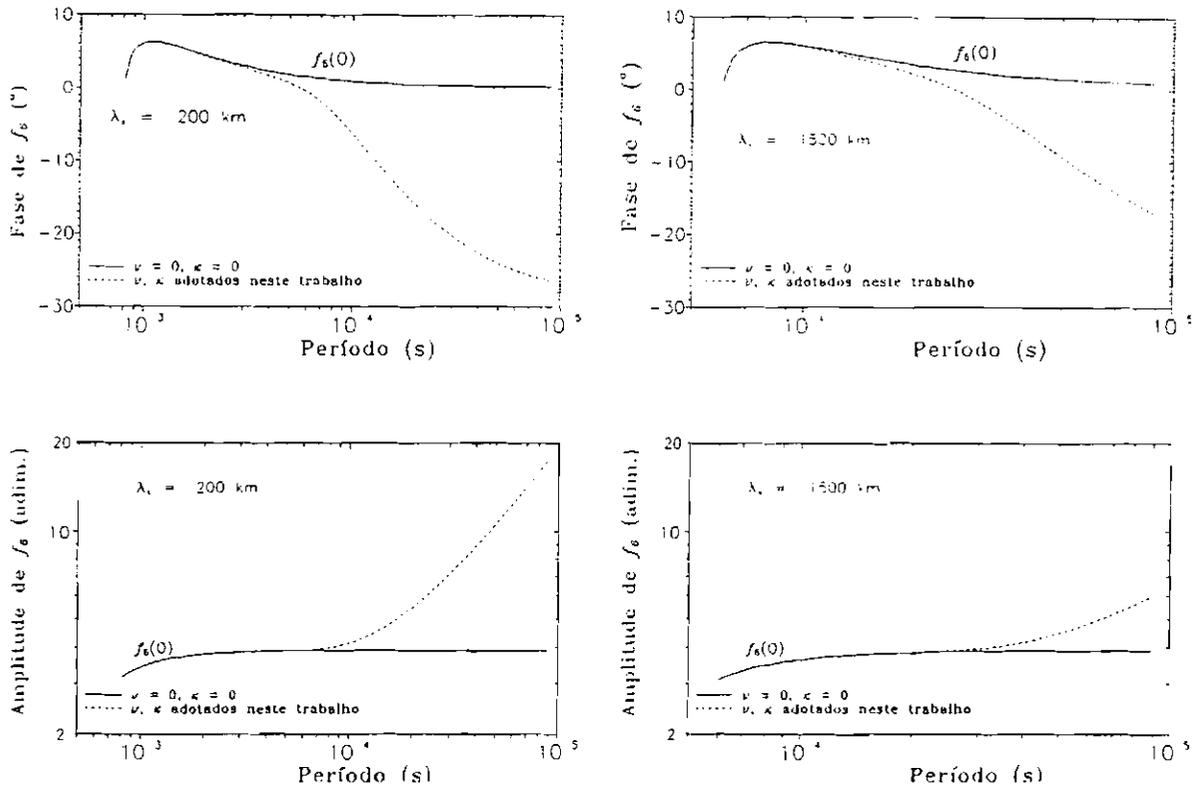


Fig. 7.6 - A magnitude (*abaixo*) e a fase (*acima*) do fator de polarização f_6 do oxigênio atômico *versus* período intrínseco da onda, calculados para uma atmosfera com e sem efeitos dissipativos, para dois valores distintos de λ_x .

Na ausência de dissipação, o fator de polarização f_6 para o oxigênio atômico revela-se quase independente do comprimento de onda horizontal. Entretanto, com a inclusão dos efeitos dissipativos, os valores de f_6 são significativamente alterados, notando-se uma certa dependência com respeito a λ_x , especialmente em períodos de onda crescentes.

- *Cálculo de χ :*

A taxa volumétrica de emissão, $\mathcal{E}_{O_2(1\Sigma)}$, é dada pela equação (2.23). Utilizando os coeficientes de *quenching* empíricos deduzidos por McDade *et al.* (1986), a equação torna-se

$$\mathcal{E}_{O_2(1\Sigma)} = \frac{A_4 k_1 n(O)^2 \rho^2}{\left\{ \ell A_5 + \left(\ell k_2^{(1)} \frac{n(O)}{\rho} + k_2^{(2)} + (\ell - 1) k_2^{(1)} \right) \rho \right\} \times \left\{ C^{(0)} + C^{(1)} n(O) + \frac{C^{(2)}}{\ell} \rho \right\}}, \quad (7.7A)$$

onde ℓ é a razão $\rho/n(O_2)$, aproximadamente constante na mesopausa, e igual a $5 \pm 0, 2$. Os coeficientes de *quenching*, são definidos pelas seguintes equações,

$$\begin{aligned} C^{(0)} &= (\alpha\gamma)^{-1} A_*/k_{\downarrow}^{(2)}, \\ C^{(1)} &= (\alpha\gamma)^{-1} k_{\downarrow}^{(1)}/k_{\downarrow}^{(2)}, \\ C^{(2)} &= (\alpha\gamma)^{-1} (1 + (1 + \ell) k_{\downarrow}^{(3)}/k_{\downarrow}^{(2)}), \end{aligned}$$

que agrupam as taxas de reação da molécula precursora (O_2^*) nas reações de transferência de energia. Os valores adotados neste trabalho para os parâmetros C 's são os seguintes:

$$\begin{aligned} C^{(0)} &= 0 \quad (\text{cm}^{-3}) \\ C^{(1)} &= 33 \quad (\text{adim.}) \\ C^{(2)} &= 7,5 \quad (\text{adim.}). \end{aligned}$$

O procedimento de linearização padrão aplicado à equação (7.74), impondo $k_{2(O)}^{(1)} = 0$ (reação R3.1), resulta

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_o + \mathcal{E}_o \left\{ (1 + \beta_o) \frac{n'(O)}{n_o(O)} + (2 - \alpha_o - \beta_o) \frac{\rho'}{\rho_o} + \frac{k_1'}{k_{1(O)}} \right\}, \quad (7.75)$$

onde as quantidades \mathcal{E}_o , α_o e β_o são definidas em termos das taxas de reação e das densidades básicas dos constituintes:

$$\mathcal{E}_o = \frac{A_4 k_{1(O)} n_o(O)^2 \rho_o^2}{\{ \ell A_5 + (k_{2(O)}^{(2)} + (\ell - 1) k_{\downarrow}^{(3)}) \rho_o \} \times \{ C^{(1)} n_o(O) + (C^{(2)}/\ell) \rho_o \}}, \quad (7.76)$$

$$\alpha_o = \frac{k_{2(O)}^{(2)} + (\ell - 1) k_{\downarrow}^{(3)}}{(\ell/\rho_o) A_5 + k_{2(O)}^{(2)} + (\ell - 1) k_{\downarrow}^{(3)}}, \quad (7.77)$$

$$\beta_o = \frac{(C^{(2)}/\ell) \rho_o}{C^{(1)} n_o(O) + (C^{(2)}/\ell) \rho_o}. \quad (7.78)$$

Admitindo-se a solução sinusoidal harmônica (equação 7.15) em $\mathcal{E}'/\mathcal{E}_o$,

$$\widehat{\mathcal{E}} = (1 + \beta_o) \widehat{n(O)} + (2 - \alpha_o - \beta_o) \widehat{\rho} - 2 \widehat{T},$$

resulta, da definição de χ (equação 7.68),

$$\chi_{O_2(1S)} = (1 + \beta_o) f_6(O) + (2 - \alpha_o - \beta_o) f_3 - 2. \quad (7.79)$$

7.3.2 - Modelo fotoquímico para o OH* (9-4)

As reações relevantes para a produção de OH* (9-4) são apresentadas na Tabela (7.2). Este conjunto inclui os principais processos para a produção e perda de O₃, H e OH, e a perda de O, próximo a região da mesopausa. As reações que envolvem o radical HO₂ foram negligenciadas, visto que elas não contribuem significativamente na produção total da hidroxila excitada (Kaye, 1988; Meriwether, 1989).

TABELA 7.1 - REAÇÕES E COEFICIENTES CINÉTICOS RELATIVOS À EXCITAÇÃO DE OH* (9-4)

Reação	Coef.	Coef. Linearizado	θ	Referência
R1. $H + O_3 \rightarrow OH + O_2$	a_2	$1,4 \times 10^{-10} e^{-470/T_0}$	$470/T_0$	DeMore <i>et al.</i> 1985
$H + O_3 \rightarrow OH^*(v' \leq 9) + O_2$	$\epsilon(v') a_2$	$a_{2(9)} (\epsilon(9) = 0.32)$	$470/T_0$	Ohoyama <i>et al.</i> 1985
R2. $O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$	k_2	$6,0 \times 10^{-34} \left(\frac{T_0}{300}\right)^{-2,3}$	-2,3	DeMore <i>et al.</i> 1985
R3. $OH + O \rightarrow H + O_2$	a_3	$2,2 \times 10^{-11} e^{117/T_0}$	$-117/T_0$	DeMore <i>et al.</i> 1985
R4. $OH^*(v') + M_i \rightarrow \dots$	$a_6^{(v')}(v')$	(texto)	--	
R5. $OH^*(v') + M_i \rightarrow OH^*(v'') + M_i$	$a_6^{(v')}(v', v'')$	(texto)	--	
R6. $OH(v') \rightarrow OH(v'') + h\nu$ (9-4)	$A_1(v', v'')$	$A_1(9,4) = 1.189$	--	Mies, 1974
R7. $OH(v') \rightarrow OH + h\nu$ (total)		$\sum_{v=0}^9 A_1(9,v) = 300$	--	Mies, 1974

Os termos de produção e perda para as espécies minoritárias O, H, O₃ e OH, respectivamente, são obtidos via aplicação das equações (7.42) e (7.43):

$$\begin{aligned}
 O: & \begin{cases} P = 0 \\ L = k_2 n(O) n(O_2) n(M) + a_3 n(O) n(OH) \end{cases} \\
 H: & \begin{cases} P = a_5 n(O) n(OH) \\ L = a_2 n(H) n(O_3) \end{cases} \\
 O_3: & \begin{cases} P = k_2 n(O) n(O_2) n(M) \\ L = a_2 n(H) n(O_3) \end{cases} \\
 OH: & \begin{cases} P = a_2 n(H) n(O_3) \\ L = a_3 n(O) n(OH) \end{cases}
 \end{aligned}$$

• Cálculo de f_6 :

O procedimento de linearização é semelhante ao empregado para o modelo fotoquímico de O₂(b¹Σ_g⁺, 0-1). Então, omitindo os detalhes algébricos, o conjunto $f_6()$ pode ser escrito como:

$$\begin{bmatrix}
i\Omega + a_{5(o)} n_o(\text{OH}) + \frac{1}{\ell} k_{2(o)} \rho_o^2 & 0 & 0 & a_{5(o)} n_o(\text{OH}) \\
-a_{5(o)} \frac{n_o(\text{O}) n_o(\text{OH})}{n_o(\text{H})} & i\Omega + a_{2(o)} n_o(\text{O}_3) & a_{2(o)} n_o(\text{O}_3) & -a_{5(o)} \frac{n_o(\text{O}) n_o(\text{OH})}{n_o(\text{H})} \\
-\frac{1}{\ell} k_{2(o)} \frac{n_o(\text{O})}{n_o(\text{O}_3)} \rho_o^2 & a_{2(o)} n_o(\text{H}) & i\Omega + a_{2(o)} n_o(\text{H}) & 0 \\
a_{5(o)} n_o(\text{O}) & -a_{2(o)} \frac{n_o(\text{H}) n_o(\text{O}_3)}{n_o(\text{OH})} & -a_{2(o)} \frac{n_o(\text{H}) n_o(\text{O}_3)}{n_o(\text{OH})} & i\Omega + a_{5(o)} n_o(\text{O})
\end{bmatrix} \times$$

$$\times \begin{bmatrix} f_6(\text{O}) \\ f_6(\text{H}) \\ f_6(\text{O}_3) \\ f_6(\text{OH}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_2/H_o(\text{O}) - f_1 - \frac{1}{\ell} k_{2(o)} \rho_o^2 (2f_3 - 2.3) + a_{5(o)} n_o(\text{OH}) \frac{117}{T_o} \\ f_2/H_o(\text{H}) - f_1 - a_{5(o)} \frac{n_o(\text{O}) n_o(\text{OH})}{n_o(\text{H})} \frac{117}{T_o} - a_{2(o)} n_o(\text{O}_3) \frac{470}{T_o} \\ f_2/H_o(\text{O}_3) - f_1 + \frac{1}{\ell} k_{2(o)} \frac{n_o(\text{O})}{n_o(\text{O}_3)} \rho_o^2 (2f_3 - 2.3) - a_{2(o)} n_o(\text{H}) \frac{470}{T_o} \\ f_2/H_o(\text{OH}) - f_1 + a_{2(o)} \frac{n_o(\text{H}) n_o(\text{O}_3)}{n_o(\text{OH})} \frac{470}{T_o} + a_{5(o)} n_o(\text{O}) \frac{117}{T_o} \end{bmatrix}, \quad (7.80)$$

onde $n(\text{M}) = \rho$ e $\ell = \rho/n(\text{O}_2)$ (aproximadamente constante na mesopausa). A inversão matricial da equação (7.80) produz o vetor solução f_6 .

A amplitude e fase características da flutuação da densidade relativa do oxigênio atômico, $f_6(\text{O})$, do hidrogênio atômico, $f_6(\text{H})$, do ozônio, $f_6(\text{O}_3)$, e da hidroxila, $f_6(\text{OH})$, em função do período intrínseco da onda ($2\pi/\Omega$), para dois valores distintos de λ_x (200 e 1500 km), na presença e ausência de dissipação atmosférica, são exibidas na Figura 7.7. Os fatores de polarização foram calculados no pico de emissão de OH^* (9-4) (em torno de 88 km), empregando os seguintes valores para os constituintes atmosféricos — o modelo termosférico de Hedin (1987) é usado para o oxigênio atômico e o gás majoritário; enquanto que o modelo mesosférico de Rodrigo *et al.* (1991) é referenciado para o hidrogênio atômico, ozônio e a hidroxila —:

Constituinte:	n_o (cm^{-3})	H_o (km)
O	$1,69 \times 10^{11}$	-3,62
H	$2,06 \times 10^7$	-1,78
O_3	$5,39 \times 10^9$	1,53
OH	$5,92 \times 10^4$	4,01
M ($\text{O}_2 + \text{N}_2$)	$8,82 \times 10^{13}$	7,05

Em geral, os valores de f_6 para cada constituinte minoritário são afetados pela inclusão dos efeitos difusivos, sobretudo em períodos de onda longos, e quase todos são modificados da mesma maneira, exceto porém os valores de f_6 para a hidroxila, que mostram uma significativa dependência com o comprimento de onda horizontal (λ_x), mesmo na ausência de dissipação atmosférica. Uma mudança de fase brusca de $-\pi$ para π ocorreu na fase de $f_6(\text{O}_3)$. Esta descontinuidade, embora desprovida de algum sentido físico, está associada ao modelo de escala de altura para o ozônio, $H_o(\text{O}_3)$, empregado na presente análise.

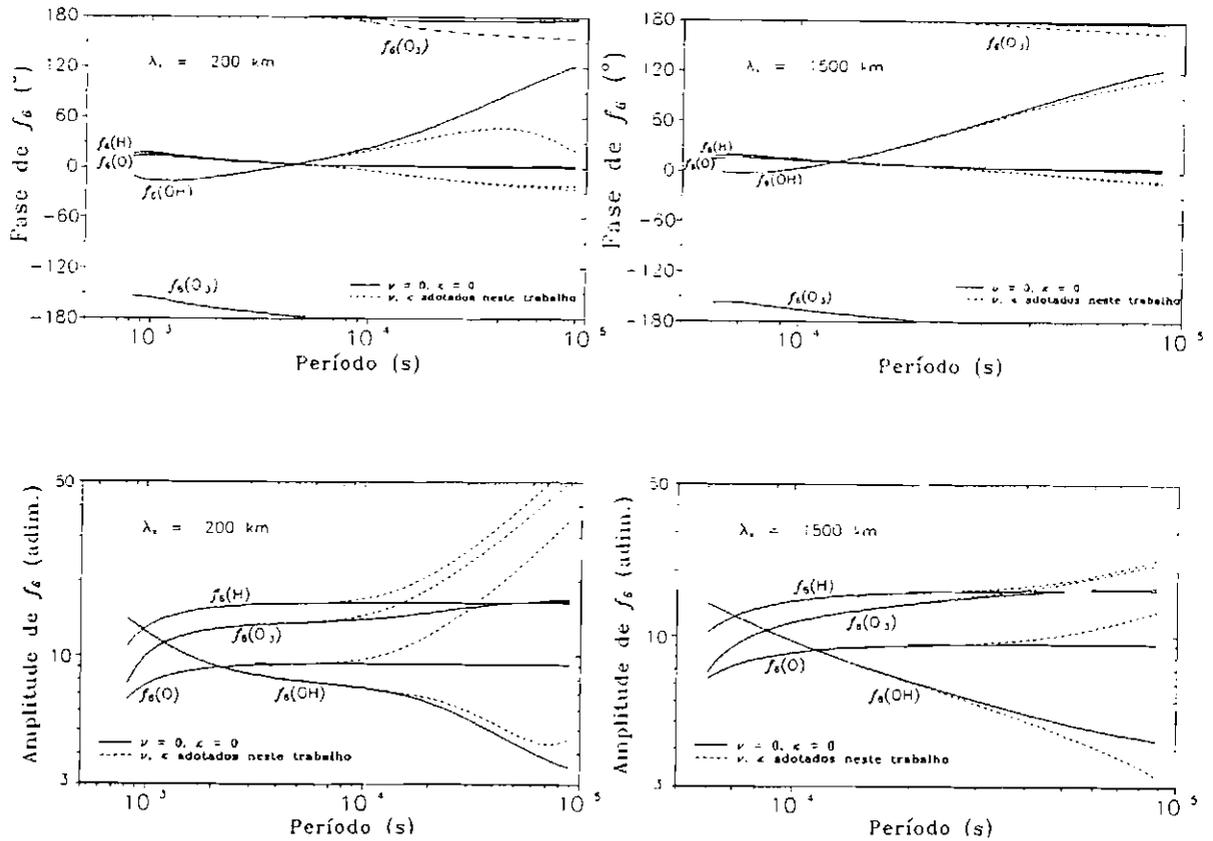


Fig. 7.7 - A magnitude (*abaixo*) e a fase (*acima*) do fator de polarização f_6 do oxigênio atômico, hidrogênio atômico, ozônio e hidroxila *versus* período intrínseco da onda, calculados para uma atmosfera com e sem efeitos dissipativos, para dois valores distintos de λ_x .

Uma análise da importância comparativa da química e dinâmica no cálculo das flutuações relativas das densidades numéricas dos constituintes minoritários mostra que, neste caso, é essencial incluir a química para o O_3 e OH em todos os períodos de onda, visto que as respectivas constantes de tempo fotoquímicas na região da mesopausa são da mesma ordem que os períodos de ondas de gravidade observados. Com relação aos constituintes H e O , apenas considerando-se os efeitos da dinâmica, ou mais propriamente, o transporte vertical de H e O , é suficiente para descrever corretamente as flutuações nas densidades numéricas destas espécies, ou seja, H e O são quimicamente inertes. As constantes de tempo fotoquímicas de H e O na região da mesopausa são, de fato, longas quando comparadas aos períodos de ondas de gravidade característicos (menores do que 10 h).

• *Cálculo de χ :*

A expressão para a taxa volumétrica de emissão de OII* (9-4) é fornecida pela equação (3.13). Referindo-se aos parâmetros de modelo de distribuição vibracional obtidos por McDade *et al.* (1991), a equação (3.13) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\mathcal{E}_{\text{OII}^* (9,4)} = \frac{a(9,4) \epsilon(9) a_2 n(\text{H}) n(\text{O}_3)}{1 + C_L^{(1)} n(\text{O}) + C_L^{(2)} \rho}, \quad (7.82)$$

onde $a(9,4) = A_{1(9,4)} / \sum_{v=0}^8 A_{1(9,v)}$ e as quantidades empíricas C_L relacionam os coeficientes cinéticos $a_{L(v)}$:

$$C_L^{(1)} = \frac{a_L^{(1)}(9)}{\sum_{v=0}^8 A_{1(9,v)}},$$

$$C_L^{(2)} = \frac{a_L^{(2)}(9) + (\ell - 1) a_L^{(3)}(9)}{\ell \sum_{v=0}^8 A_{1(9,v)}}.$$

Os valores empregados para os parâmetros C_L 's neste trabalho dizem respeito ao limite máximo de *quenching* proporcionado pelo oxigênio atômico na reação R4:

$$C_L^{(1)} = 1,5 \times 10^{-13} \quad (\text{cm}^3)$$

$$C_L^{(2)} = \frac{1}{\ell} \times 5,3 \times 10^{-14} \quad (\text{cm}^3)$$

Linearizando a equação (7.81) pelos métodos convencionais,

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_1 \left\{ -\alpha_0 \frac{n'(O)}{n_0(O)} - \beta_0 \frac{\rho'}{\rho_0} + \frac{n'(H)}{n_0(H)} + \frac{n'(O_3)}{n_0(O_3)} + \frac{a_2'}{a_{2(9)}} \right\}, \quad (7.83)$$

onde as quantidades \mathcal{E}_0 , α_0 e β_0 são definidas em termos das taxas de reação e das densidades básicas dos constituintes:

$$\mathcal{E}_0 = \frac{a(9,4) \epsilon(9) a_{2(9)} n_0(H) n_0(O_3)}{1 + C_L^{(1)} n_0(O) + C_L^{(2)} \rho_0}, \quad (7.84)$$

$$\alpha_0 = \frac{C_L^{(1)} n_0(O)}{1 + C_L^{(1)} n_0(O) + C_L^{(2)} \rho_0}, \quad (7.85)$$

$$\beta_0 = \frac{C_L^{(2)} \rho_0}{1 + C_L^{(1)} n_0(O) + C_L^{(2)} \rho_0}, \quad (7.86)$$

Admitindo-se válida a solução sinusoidal harmônica (7.15) em $\mathcal{E}'/\mathcal{E}_0$, e tendo em vista a definição de χ (equação 7.68),

$$\chi_{\text{OII}^*} = f_6(H) + f_6(O_3) - \alpha_0 f_6(O) - \beta_0 f_3 + \frac{470}{T_0}. \quad (7.87)$$

7.4 - ANÁLISE QUANTITATIVA DE η

As equações (7.79) e (7.86) mostram que o fator de polarização χ das emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$ depende da altitude z através de H_o , que representa a distribuição vertical da densidade de cada constituinte minoritário, e dos números adimensionais α_o e β_o , responsáveis pelos efeitos de *quenching*. Os perfis em altitude das densidades numéricas básicas do gás majoritário (ρ_o), do oxigênio atômico ($n_o(O)$), do hidrogênio atômico ($n_o(H)$), do ozônio ($n_o(O_3)$) e da hidroxila ($n_o(OH)$) são mostrados na Figura 7.8, envolvendo uma faixa de altura de interesse para as emissões aqui consideradas. O modelo termosférico MSIS-86, devido a Hedin (1987) é usado para o oxigênio atômico e o gás majoritário, em uma latitude de $-23^\circ S$. O modelo fotoquímico de Rodrigo *et al.* (1991), desenvolvido para latitudes médias, é empregado para o hidrogênio atômico, ozônio e a hidroxila.

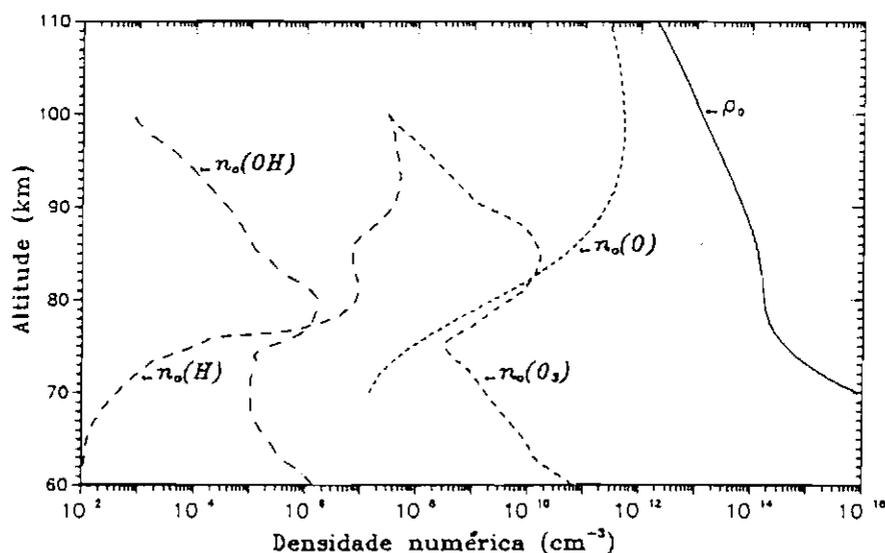


Fig. 7.8 - Perfis em altitude das densidades numéricas básicas das espécies atmosféricas (Hedin, 1987 e Rodrigo *et al.* 1991). ρ_o = densidade de M ($O_2 + N_2$).

No caso da emissão de *nightglow* do $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, os números de *quenching*, α_o e β_o , apresentam a mesma ordem de grandeza, variando entre os valores de 0 a 1, e são funções monótonas decrescentes com a altitude crescente, *i.e.*, de acordo com o modelo de transferência de energia, os mecanismos de *quenching* predominam na parte inferior da camada de emissão. Considerando, por sua vez, a emissão de *nightglow* do $OH^*(9-4)$, os números α_o e β_o variam entre os valores de 0 e 1; entretanto $\alpha_o \ll \beta_o$, indicando que as reações de *quenching* envolvendo o gás majoritário prevalecem sobre as reações que contêm átomos de oxigênio.

As escalas de altura dos constituintes minoritários são calculadas usando modelos polinomiais de segundo grau — fórmulas para a estimativa de derivadas pela técnica da diferença central, conforme Rice (1983). Valores positivos de H_0 correspondem a um decrescimento na densidade dos constituintes minoritários com a altitude; enquanto que valores negativos de H_0 , a um crescimento na densidade. Em particular, para o oxigênio, os valores de H_0 crescem, em módulo, de valores negativos para valores positivos.

7.4.1 - Modelo de Camada Simples — Cálculo de η

De modo a examinar a influência das quantidades H_0 , α_0 e β_0 sobre os valores de η , é instrutivo considerar inicialmente uma camada de emissão de espessura nula, ou seja, supor que estas três quantidades sejam constantes com a altitude. Neste caso, χ independe da coordenada z e, tendo em vista o que fora discutido sobre a equação (7.68),

$$\begin{aligned}\eta &= \chi \\ &= |\eta| e^{-i\Phi},\end{aligned}\tag{7.88}$$

onde a amplitude de η é calculada por:

$$|\eta| = |\chi| = \sqrt{(\Re\{\chi\})^2 + (\Im\{\chi\})^2},\tag{7.89}$$

e a fase,

$$\Phi = \phi_B - \phi_{T_m} = \arctan\left(\frac{-\Im\{\chi\}}{\Re\{\chi\}}\right), \quad -\pi \leq \phi \leq \pi,\tag{7.90}$$

quando a taxa de emissão aparente, B , e a temperatura medida, T_m , são formas de onda harmônicas de frequência angular intrínseca Ω :

$$\begin{aligned}\frac{B'}{B_0} &= R_B e^{i(\Omega t - \phi_B)}, \\ \frac{T_m'}{T_m^{(0)}} &= R_{T_m} e^{i(\Omega t - \phi_{T_m})}.\end{aligned}$$

A temperatura medida precede ou sucede a taxa de emissão aparente, dependendo do sinal de Φ ser positivo ou negativo, respectivamente.

As Figuras 7.9 a 7.16 mostram os resultados de $\eta = \chi$ para as emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$ em função do período intrínseco ($2\pi/\Omega$) da onda de gravidade interna, considerando uma atmosfera com a ausência e presença dos efeitos difusivos. A estrutura horizontal da onda é examinada através da variação do comprimento de onda λ_x entre 200 km e 2000 km.

• *Resultados de $\eta = \chi$ para $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$:*

As Figuras 7.9 e 7.10 exibem os valores calculados da magnitude e fase características de $\eta_{O_2(b)} = \chi_{O_2(b)}$, em três níveis de altitude no entorno do pico de emissão: 93 km (gráfico inferior), 94 km (central) e 95 km (superior). Os valores de α_s , β_s e H_s são calculados nas respectivas alturas.

Considerando a camada inferior ($z = 93$ km) e a dissipação atmosférica nula os valores de $|\eta|$ e Φ variam sobre uma estreita faixa de 4,7 a 5,3 e -4° a 0° , respectivamente. Para um certo λ_x , $|\eta|$ cresce com o período da onda até um valor de saturação. Fixando o período, $|\eta|$ cresce quando λ_x decresce. Entretanto, a inclusão da dissipação nesta camada causa uma situação muito diferente em períodos longos, e os valores de $\eta_{O_2(b)}$ neste regime são significativamente alterados. Por exemplo, para uma onda de $\lambda_x = 500$ km e um período de 500 min, encontra-se uma mudança em $|\eta|$ de aproximadamente 40% em relação aos valores calculados no caso de dissipação nula ($|\eta| = 5,3$ sem dissipação e $|\eta| = 7,4$ com dissipação). Considerando estes mesmos parâmetros de onda, Φ altera-se de $-0,4^\circ$ (sem dissipação) a 18° (com dissipação). Outra particularidade notável é que, para um certo λ_x , os valores de $|\eta|$ obtidos com os efeitos dissipativos incluídos, começam a desviar-se dos valores de $|\eta|$ calculados sem os efeitos de dissipação, em períodos onde o fator de atenuação α muda de sinal. O mesmo comportamento é notado nos valores calculados de Φ , porém de forma ainda mais sensível à inclusão da dissipação atmosférica.

A camada central ($z = 94$ km) exhibe $|\eta|$ e Φ quase constantes com o período e λ_x , pelo menos quando os efeitos dissipativos são nulos. A presença de dissipação modifica os valores de $\eta_{O_2(b)}$ na mesma proporção dos resultados anteriores.

No caso da camada superior ($z = 95$ km) e difusividade nula, os valores de $|\eta|$ situam-se entre 3,2 e 3,9, decrescendo com o período crescente (fixando λ_x), e os valores de Φ , de 1° a 6° . Na presença dos efeitos difusivos, as mesmas observações feitas anteriormente são válidas.

As Figuras 7.11 e 7.12 referem-se também ao cálculo de $\eta_{O_2(b)} = \chi_{O_2(b)}$, mas com o número de *quenching* nulo, $\alpha_s = 0$.¹ Nota-se que os resultados de $\eta_{O_2(b)}$ obtidos anteriormente para camada central seguem, neste caso, o mesmo padrão dos resultados obtidos em uma altitude deslocada de 1 km para baixo, *i.e.*, em $z = 93$ km. Este fato indica que os efeitos de *quenching* fazem elevar a altitude do pico de emissão em aproximadamente 1 km. Os valores calculados para $|\eta|$ são maiores do que aqueles da Figura 7.9.

¹O número de *quenching* β_s está associado com as reações de *quenching* da molécula precursora no mecanismo de transferência de energia — e não com as reações de *quenching* de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ —, identificando mais propriamente o tipo de mecanismo. É fácil mostrar que se $\beta_s = 1$, teríamos reproduzido o mecanismo clássico de recombinação de tres corpos. Assim, em qualquer dos casos, $\beta_s \neq 0$.

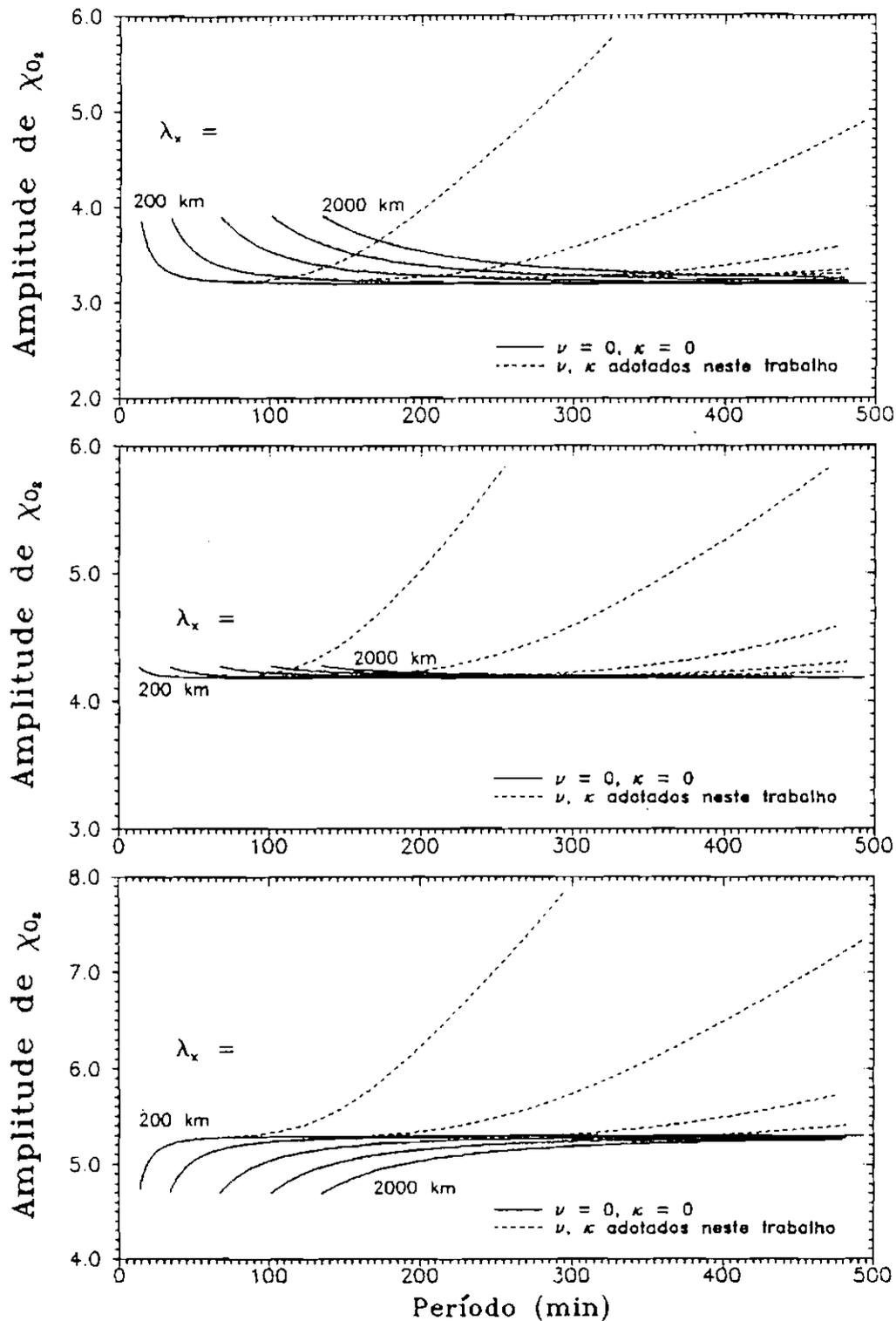


Fig. 7.9 - Resultados das amplitudes de $\eta_{O_2(b)} = \chi_{O_2(b)}$ para um modelo de camada simples, em diferentes níveis de altitude de 93 km (gráfico abaixo), 94 km (centro) e 95 km (acima), em uma atmosfera com presença (linha tracejada) e ausência de efeitos difusivos (linha sólida), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km (na respectiva ordenação).

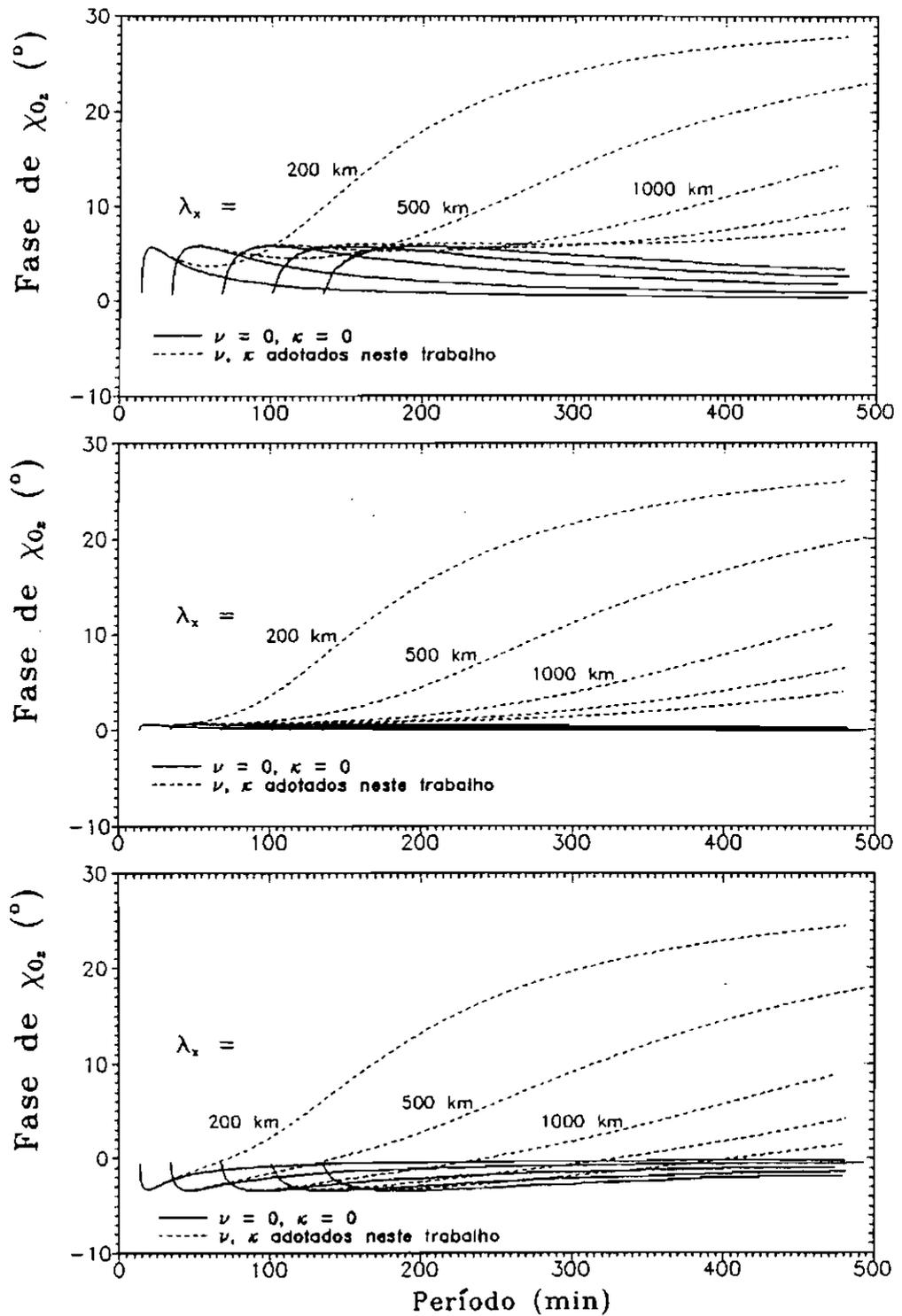


Fig. 7.10 - Resultados das fases de $\eta_{O_2(b)} = \chi_{O_2(b)}$ para um modelo de camada simples, em diferentes níveis de altitude de 93 km (gráfico abaixo), 94 km (centro) e 95 km (acima), em uma atmosfera com presença (linha tracejada) e ausência de efeitos difusivos (linha sólida), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km (na respectiva ordenação).

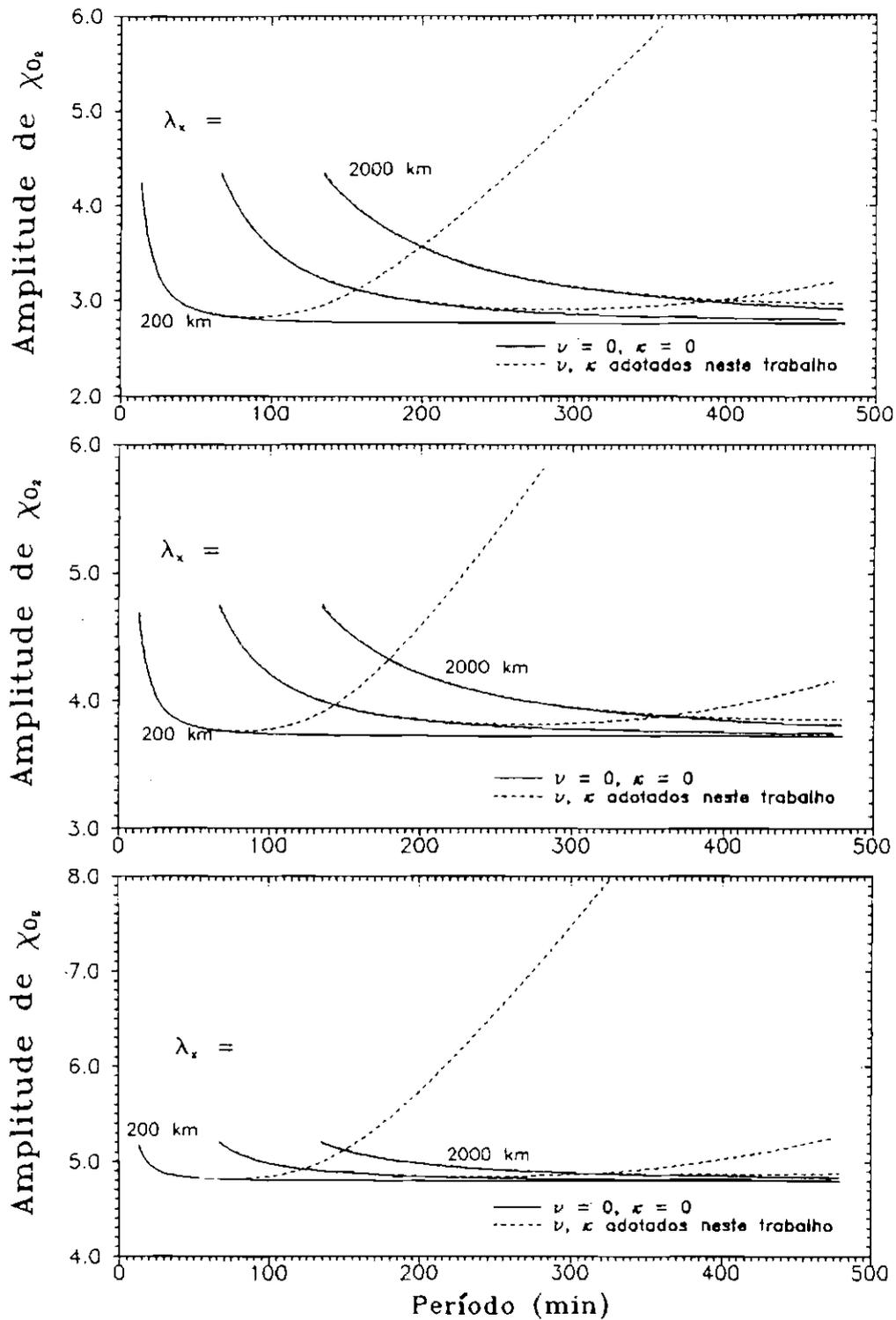


Fig. 7.11 - O mesmo da Figura 7.9, com o número de *quenching* nulo ($\alpha_s = 0$), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 1000 km e 2000 km (na respectiva ordenação).

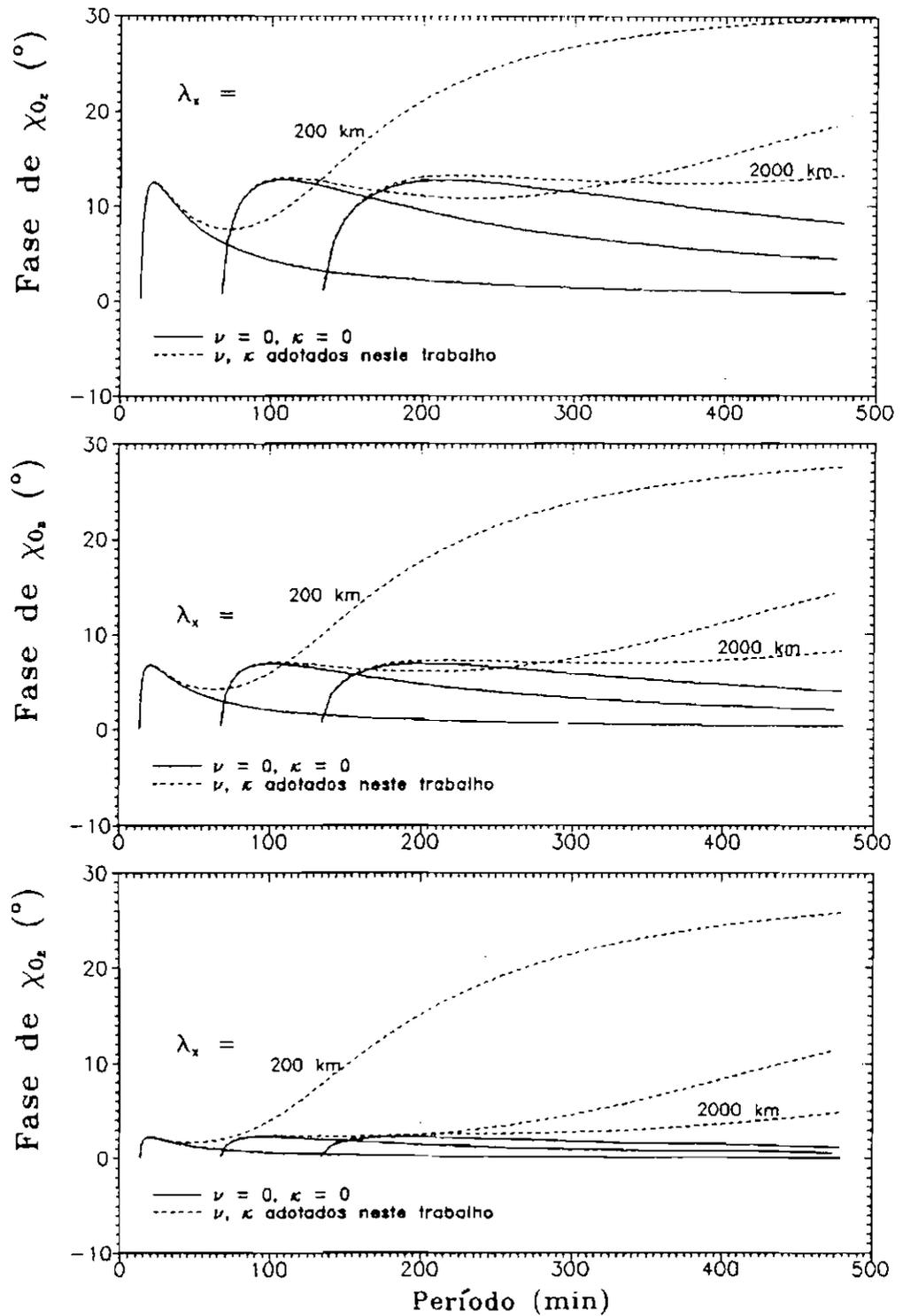


Fig. 7.12 - O mesmo da Figura 7.10, com o número de *quenching* nulo ($\alpha_0 = 0$), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 1000 km e 2000 km (na respectiva ordenação).

• *Resultados de $\eta = \chi$ para OH^* (9-4):*

As Figuras 7.13 e 7.14 mostram os valores calculados da magnitude e fase características de $\eta_{\text{OH}^*} = \chi_{\text{OH}^*}$, em três níveis de altitude no entorno do pico de emissão: 87 km (gráfico inferior), 88 km (central) e 89 km (superior). Os valores de α_0 , β_0 e H_0 são calculados nas respectivas alturas.

A camada inferior ($z = 87$ km) revela que, na ausência de dissipação, η cresce até um determinado período crítico (que depende de λ_x) e, a partir deste valor, decresce suavemente, tornando-se quase constante em períodos longos, independentemente da estrutura horizontal da onda. Praticamente as mesmas considerações valem para Φ . Com a inclusão da difusividade de momentum e térmica *eddy*, os valores de η_{OH^*} iniciam a desviar-se de seus valores sem os efeitos difusivos em períodos onde α muda de sinal (vide considerações anteriores para $\eta_{\text{O}_2(b)}$), que dependem de λ_x . Para um período limite de 500 min e $\lambda_x = 500$ km verifica-se uma mudança em $|\eta|$ de aproximadamente 15% em relação aos valores calculados no caso de dissipação nula ($|\eta| = 13,8$ sem dissipação e $|\eta| = 15,9$ com dissipação). Considerando estes mesmos parâmetros atmosféricos, a fase Φ sofre uma alteração de 10° , diminuindo a defasagem entre as flutuações na taxa de emissão aparente e temperatura medida.

Quando os efeitos dissipativos são nulos, a camada central ($z = 88$ km) exibe $|\eta|$ e Φ monótonos decrescentes com o período da onda, assumindo, para períodos longos, valores quase constantes, independentemente de λ_x . A presença de dissipação modifica os valores de η_{OH^*} na mesma proporção dos resultados discutidos anteriormente.

Com respeito à camada superior ($z = 89$ km) e difusividade nula, $|\eta|$ segue o mesmo comportamento observado na parte inferior da camada, apenas que os valores calculados aqui diferem bastante daqueles. A mesma observação pode ser feita em relação a Φ , que neste caso apresenta somente valores positivos, variando sobre uma ampla faixa. A presença dos efeitos difusivos modifica estes valores, seguindo as mesmas características observadas nas camadas logo abaixo.

As Figuras 7.15 e 7.16 referem-se também ao cálculo de $\eta_{\text{OH}^*} = \chi_{\text{OH}^*}$, porém com os números de *quenching* α_0 e β_0 nulos. Nota-se que nenhuma alteração apreciável nas três camadas consideradas foi produzida. Este fato parece indicar que os efeitos de *quenching* não alteram seriamente o perfil de emissão de OH^* (9-4), bem como os valores calculados de η_{OH^*} .

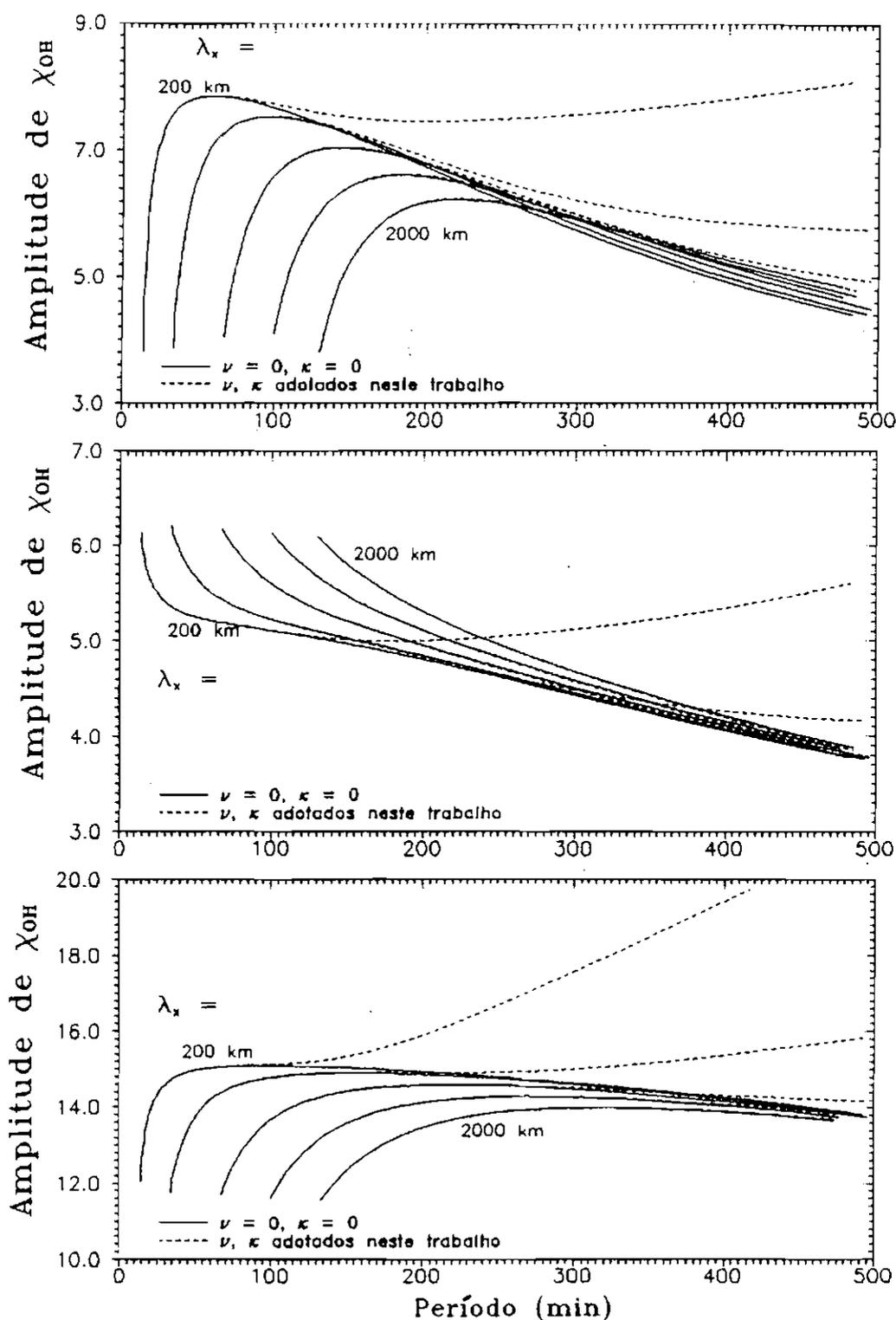


Fig. 7.13 - Resultados das amplitudes de $\eta_{OH} = \chi_{OH}$ para um modelo de camada simples, em diferentes níveis de altitude de 87 km (gráfico abaixo), 88 km (centro) e 89 km (acima), em uma atmosfera com presença (linha tracejada) e ausência de efeitos difusivos (linha sólida), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km (na respectiva ordenação).

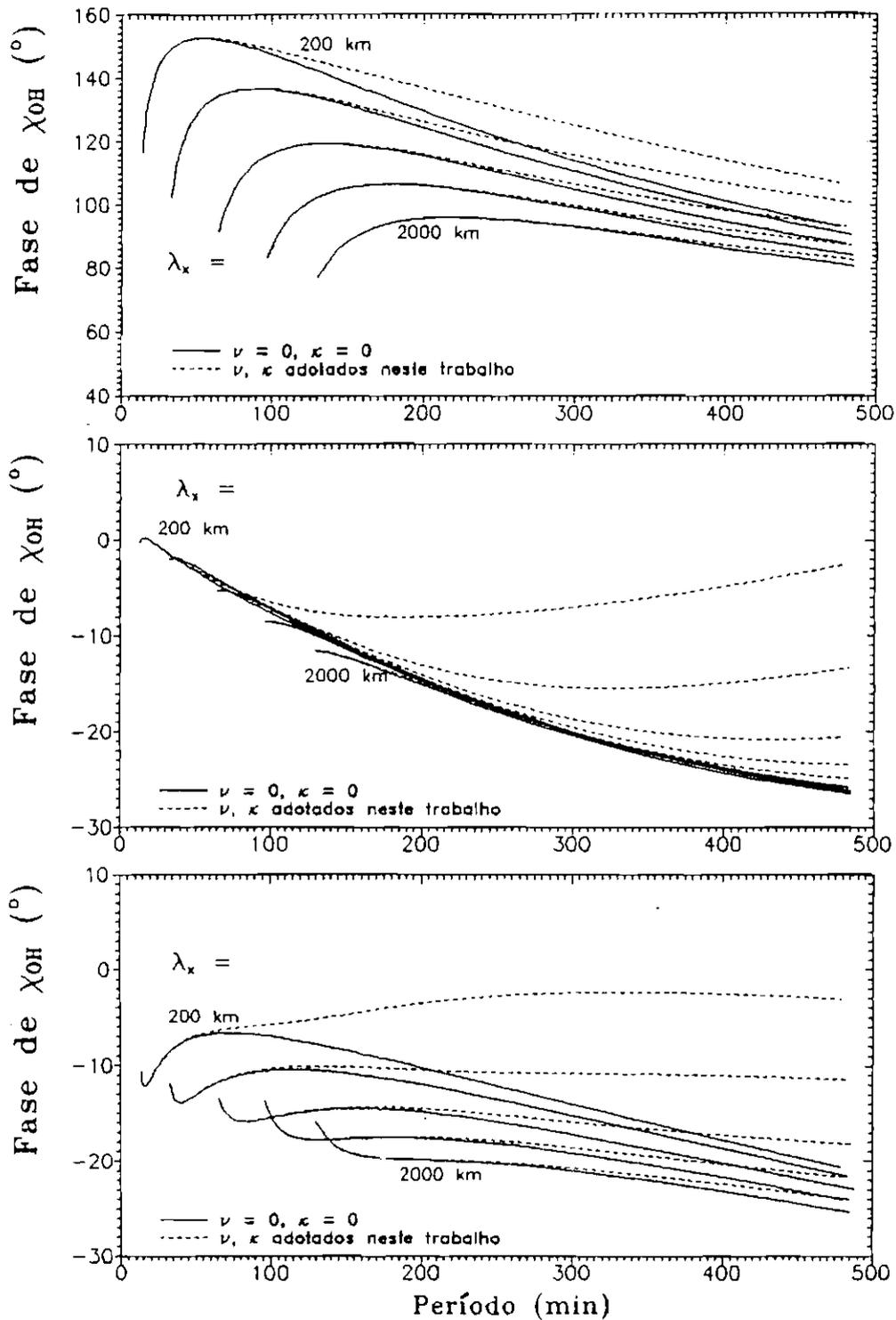


Fig. 7.14 - Resultados das fases de $\eta_{OH} = \chi_{OH}$ para um modelo de camada simples, em diferentes níveis de altitude de 87 km (gráfico abaixo), 88 km (centro) e 89 km (acima), em uma atmosfera com presença (linha tracejada) e ausência de efeitos difusivos (linha sólida), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km (na respectiva ordenação).

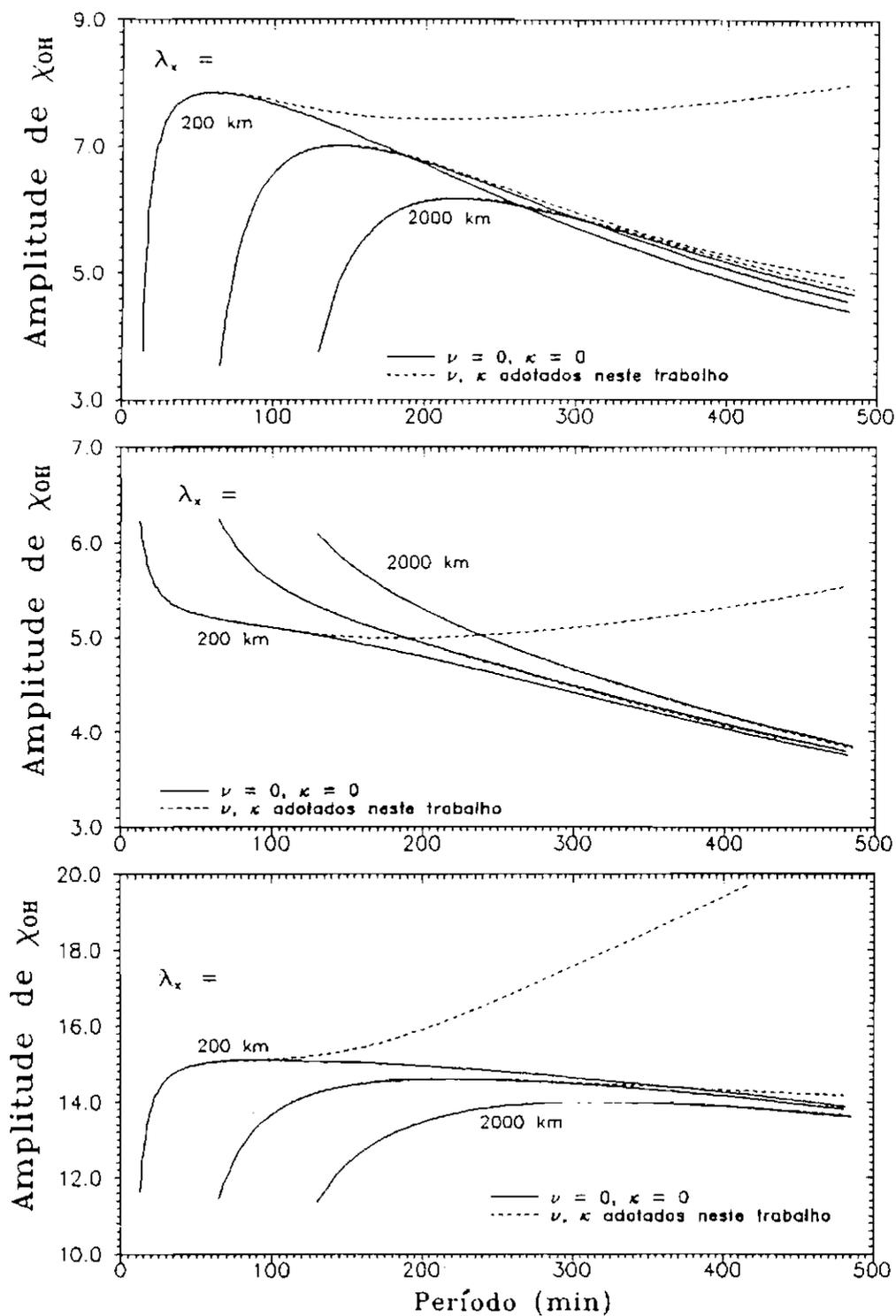


Fig. 7.15 - O mesmo da Figura 7.13, com os números de *quenching* nulos ($\alpha_n = 0$ e $\beta_n = 0$), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 1000 km e 2000 km (na respectiva ordenação).

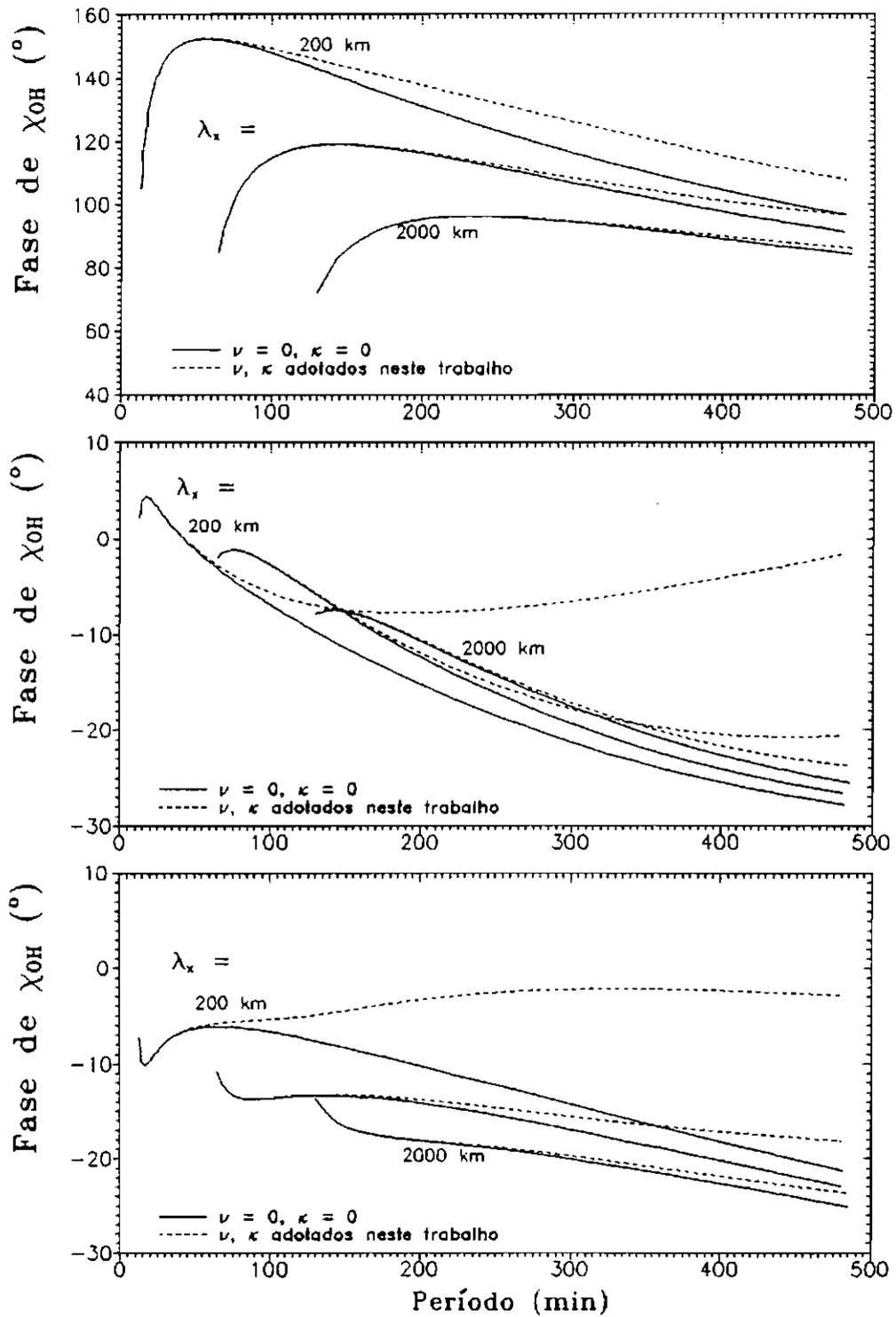


Fig. 7.16 - O mesmo da Figura 7.14, com os números de *quenching* nulos ($\alpha_n = 0$ e $\beta_n = 0$), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 1000 km e 2000 km (na respectiva ordenação).

7.4.2 - Modelo de Múltiplas Camadas — Cálculo de η

Na seção anterior apresentaram-se os resultados de $\eta = \chi$, para as emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, usando um modelo de camada simples da atmosfera perturbada por uma onda de gravidade interna que se propaga na direção vertical ascendente. No entanto as emissões de *airglow* são provenientes de regiões estendidas, cujas espessuras verticais típicas são da ordem de quilômetros. De fato, as quantidades H_0 , α , e β_0 não são constantes com a altitude, e η deve ser calculado efetuando-se a integração numérica da equação (7.67),

$$\eta = \frac{\int_{z_1}^{z_2} \mathcal{E}_0 \chi e^{(\alpha - ik_z)z} dz}{\int_{z_1}^{z_2} \mathcal{E}_0 e^{(\alpha - ik_z)z} dz},$$

sendo,

$$\eta = |\eta| e^{-i\Phi},$$

onde z_1 denota o limite inferior e z_2 o limite superior das integrações verticais. Com referência ao estado básico adotado neste trabalho (ver Figura 7.8), a altitude do pico de emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ ocorre em aproximadamente 94 km de altitude, e a espessura vertical da região de emissão²⁰ em torno de 15 km, conforme revela o perfil vertical da taxa volumétrica de emissão da Figura 7.17. No caso da emissão de $OH^*(9-4)$, a altitude do pico de emissão e a espessura vertical da camada de emissão são, respectivamente, 88 km e 17 km, conforme revela a Figura 7.17.

Para avaliar a influência de uma camada de emissão com extensão vertical não-nula sobre as flutuações relativas de B e T_m , é necessário, antes de mais nada, comparar a espessura da camada empregada no modelo de η com o comprimento de onda vertical (λ_z) associado a uma onda de gravidade interna. Caso λ_z seja aproximadamente igual ou menor do que esta espessura, as flutuações relativas de B e T_m , oriundas de diferentes níveis internos à região de emissão, poderão exibir fenômenos de *interferência* — discutidos previamente nos trabalhos de Schubert e Walterscheid (1988) e Schubert *et al.* (1991) para a emissão de OH^* —, produzindo valores muito diferentes daqueles calculados através de um modelo de camada simples. A sucessão de reforços e atenuações resultam essencialmente das várias contribuições positivas e negativas feitas via o fator complexo $e^{(\alpha - ik_z)z}$ ao numerador da equação (7.67).

²⁰Neste contexto, a espessura vertical da camada de emissão é definida como a distância vertical entre os níveis cujas intensidades são da ordem de 10% - 20% da intensidade na altura do pico de emissão.

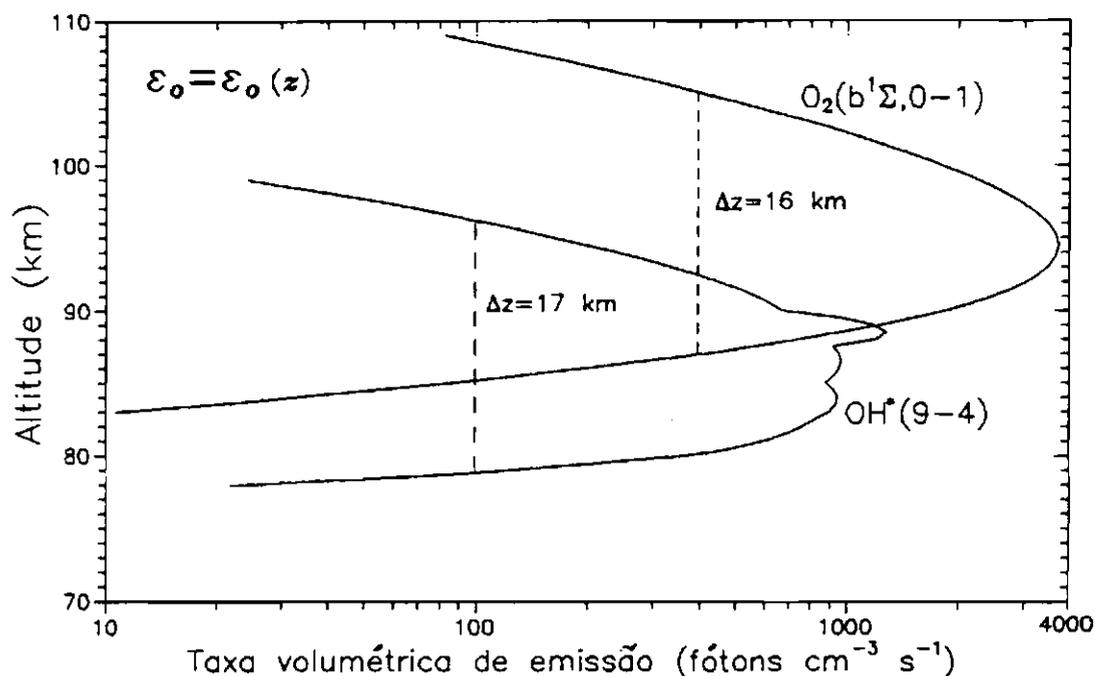


Fig. 7.17 - Taxas volumétricas de emissão, $\mathcal{E}_o = \mathcal{E}_o(z)$, para as emissões de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $\text{OH}^*(9-4)$, calculadas a partir do modelo básico de constituintes adotados no presente trabalho.

Os efeitos de interferência nos cálculos da magnitude e fase de η são mostrados nas Figuras 7.18 e 7.19, para as emissões de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $\text{OH}^*(9-4)$, empregando uma estrutura horizontal particular, $\lambda_x = 200 \text{ km}$, em uma atmosfera com $\nu = \kappa = 0$ e com as difusividades adotadas neste trabalho. O período intrínseco da onda varia entre $\sim 10 \text{ min}$ a 20 horas. O afastamento do comportamento observado nas emissões de camada simples dá-se em períodos tais que λ_z é aproximadamente igual ou menor à espessura da camada de emissão empregada no modelo de η . Nas condições de ausência dos efeitos difusivos, surgem oscilações abruptas em $|\eta|$ e Φ , nem sempre correlacionadas entre si. Deve ser notado que ambos numerador e denominador da equação (7.67) representam as transformadas de Fourier de suas respectivas funções peso. Neste sentido, o comportamento funcional do numerador difere da tendência do denominador, tal que as transições observadas na fase de $|B'/B_o| / |T_m'/T_m^{(o)}|$, em geral, não são correspondidas de similares descontinuidades na amplitude dessa razão. Um estudo mais detalhado destas características pode ser encontrado no trabalho de Hines e Tarasick (1987). Entrementes, a inclusão dos efeitos dissipativos suavizou as oscilações de interferência (em alguns casos, estas foram removidas) tanto em $|\eta|$ quanto em Φ . Uma explicação para isso é que, na

presença dos efeitos difusivos *eddy*, o comprimento de onda vertical (vide Figura 7.1) é atenuado em períodos de onda longos, ou seja, para um dado período, a dissipação atmosférica faz os valores de λ_z crescerem quando comparados com os valores de λ_z obtidos em uma atmosfera sem os efeitos dissipativos, inibindo assim os efeitos de interferência que estão associados com a espessura vertical da camada não-nula.

Felizmente na prática, as grandes variações que ocorrem em η quando λ_z é comparável ou menor do que a espessura da camada de emissão, não constituem-se em fontes potenciais de dificuldade na interpretação das medidas de *nightglow*, desde que as flutuações observadas em B e T_m geralmente estão associadas com λ_z maiores do que a espessura da camada de emissão (Schubert e Walterscheid, 1988).

Na Figura 7.20 η é calculado, em função do período intrínseco, para a emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, considerando vários comprimentos de onda horizontal $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km. O comprimento de onda vertical é restrito a valores maiores do que 14 km (espessura da camada de emissão usada no cálculo de η). A amplitude $\eta_{O_2(b)}$ é sensível à inclusão da dissipação, especialmente em períodos de onda maiores, e varia de 4,2 a 6,0. Para um mesmo período, a presença de dissipação tende a aumentar a amplitude de $\eta_{O_2(b)}$. Este efeito é predominantemente devido a dinâmica das ondas de gravidade, tendo em vista a tendência de λ_z assumir um valor constante (dependente da estrutura horizontal) quando a difusão *eddy* é levada em consideração, conduzindo a valores crescentes nas flutuações da taxa de emissão, quando comparadas com o caso de difusividade nula — embora, fisicamente, a dissipação atmosférica seja responsável pela redução das amplitudes de onda que se propagam verticalmente. O comportamento da fase $\Phi_{O_2(b)}$, ao contrário, revela-se pouco sensível à inclusão dos efeitos dissipativos. A faixa de valores assumida por $\Phi_{O_2(b)}$ é de 0° a 60° (a temperatura medida precede a taxa de emissão aparente), sendo que para λ_x crescente a fase aproxima-se de zero.

Os resultados de η apresentados na Figura 7.21 para a emissão de $OH^*(9-4)$ demonstram a importância da inclusão dos efeitos dissipativos. O comprimento de onda vertical restringe-se a valores maiores do que 14 km (espessura da camada de emissão usada no cálculo de η). Neste caso a faixa de valores de $|\eta|$ é mais ampla do que no caso da emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, variando de 4,8 a 16, sendo que, em períodos de onda mais longos, a presença da dissipação modifica as magnitudes de η_{OH^*} . Em relação a Φ_{OH^*} , os valores previstos variam entre -60° e 0° (a taxa de emissão sucede a temperatura medida), observando que para λ_x crescente Φ_{OH^*} aproxima-se de zero. Com a presença dos efeitos difusivos, a fase Φ_{OH^*} apresenta uma característica peculiar em períodos de onda crescentes: diminui a defasagem entre as flutuações relativas de B e T_m . Chegou-se a esta mesma constatação pelo modelo de camada simples.

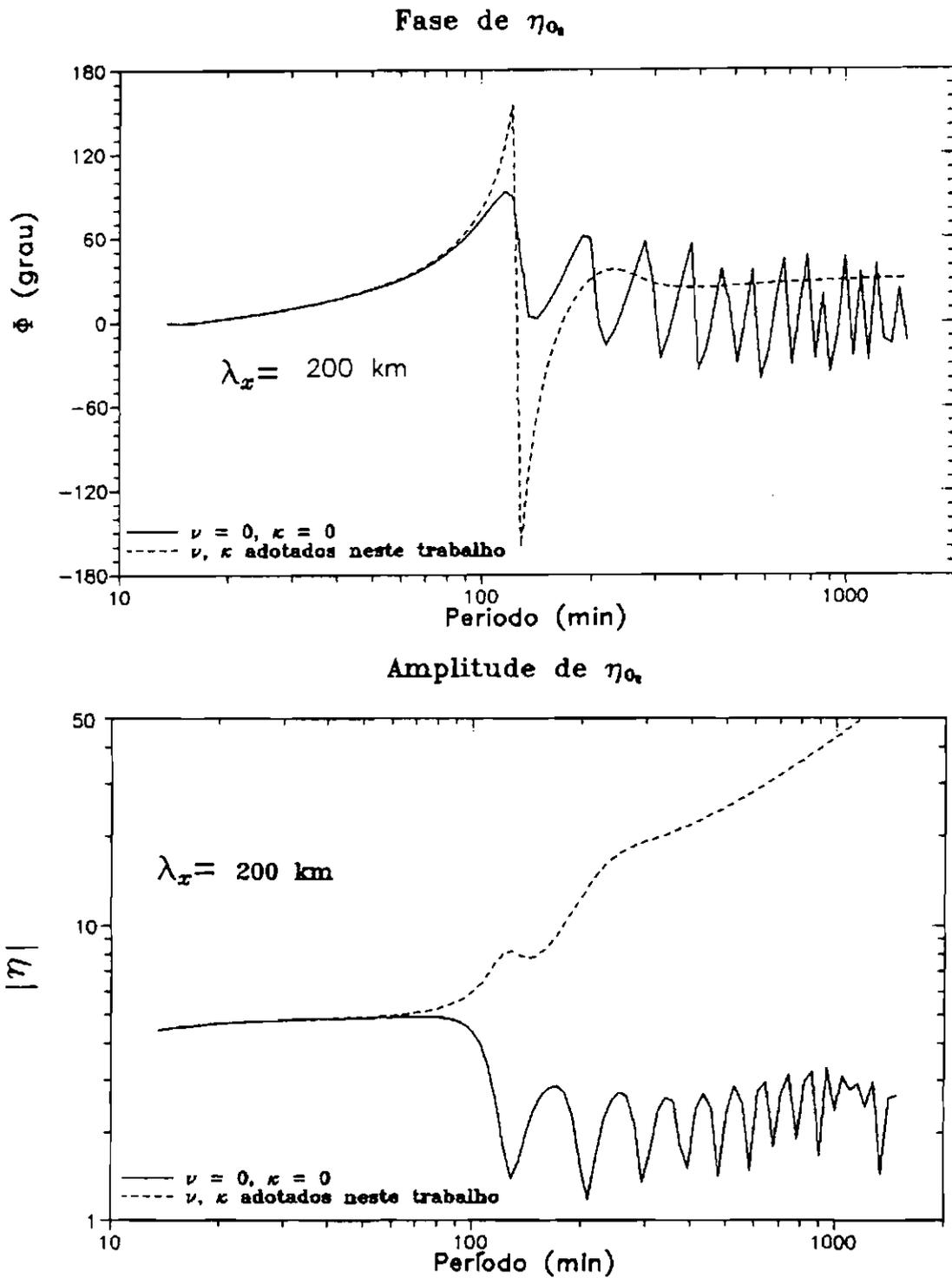


Fig. 7.18 - Efeitos de interferência — resultados das amplitudes (gráfico abaixo) e fases (acima) de $\eta_{0_1(t)}$ para um modelo de múltiplas camadas, considerando uma camada de emissão de $z_1 = 88 \text{ km}$ e $z_2 = 102 \text{ km}$, em uma atmosfera com presença (linha tracejada) e ausência de efeitos difusivos (linha sólida), usando $\lambda_x = 200 \text{ km}$. O período de onda usado é o período intrínseco.

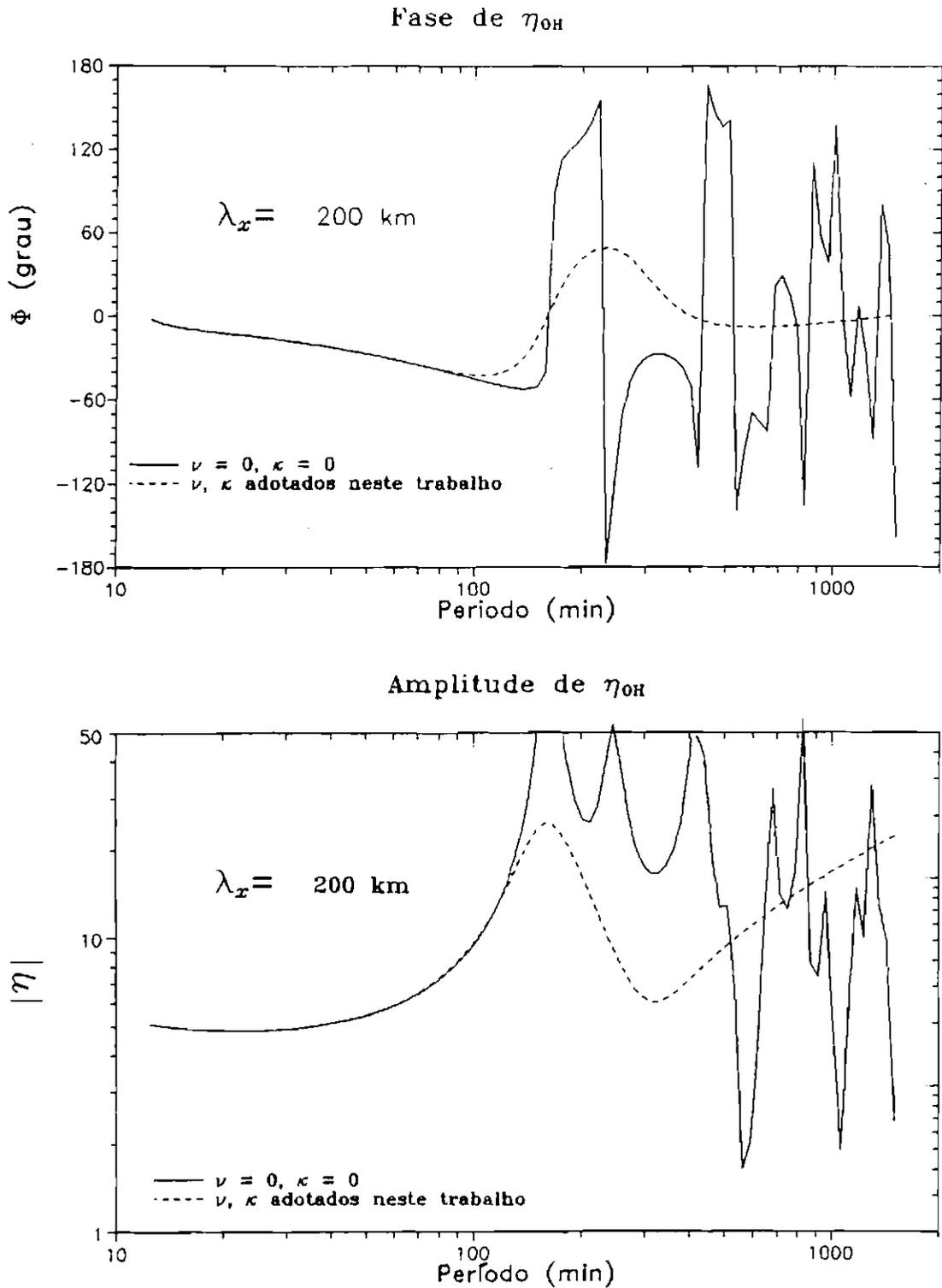


Fig. 7.19 - Efeitos de interferência — resultados das amplitudes (gráfico abaixo) e fases (acima) de η_{OH} , para um modelo de múltiplas camadas, considerando uma camada de emissão de $z_i = 81$ km e $z_s = 95$ km, em uma atmosfera com presença (linha tracejada) e ausência de efeitos difusivos (linha sólida), usando $\lambda_x = 200$ km. O período de onda usado é o período intrínseco.

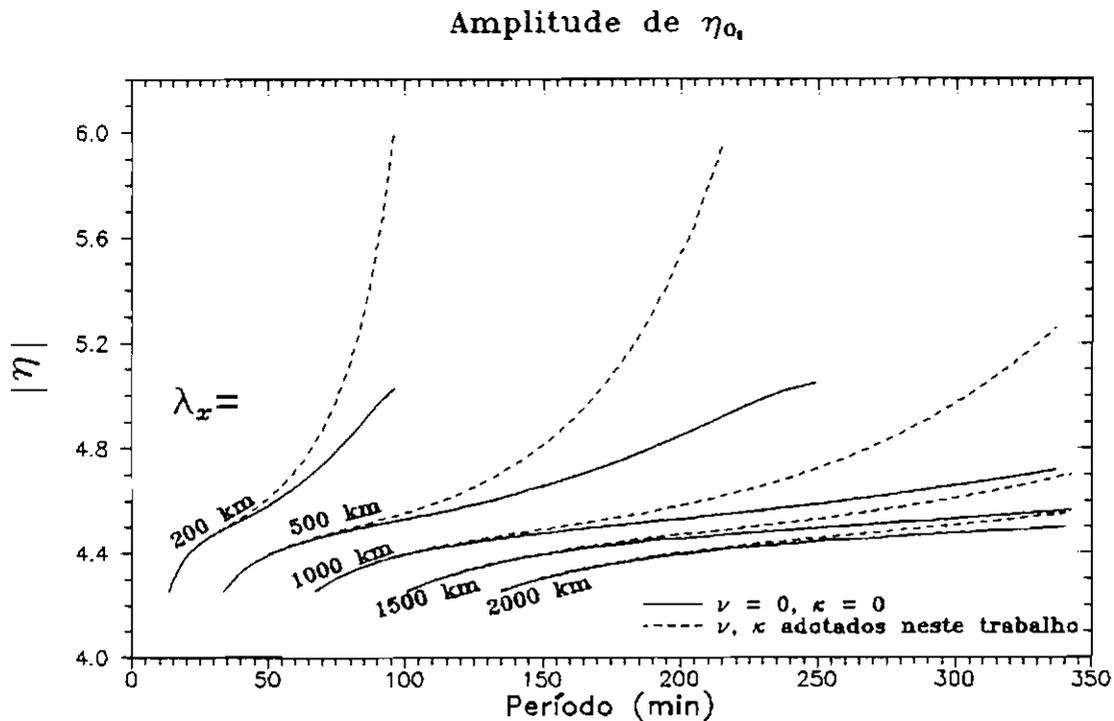
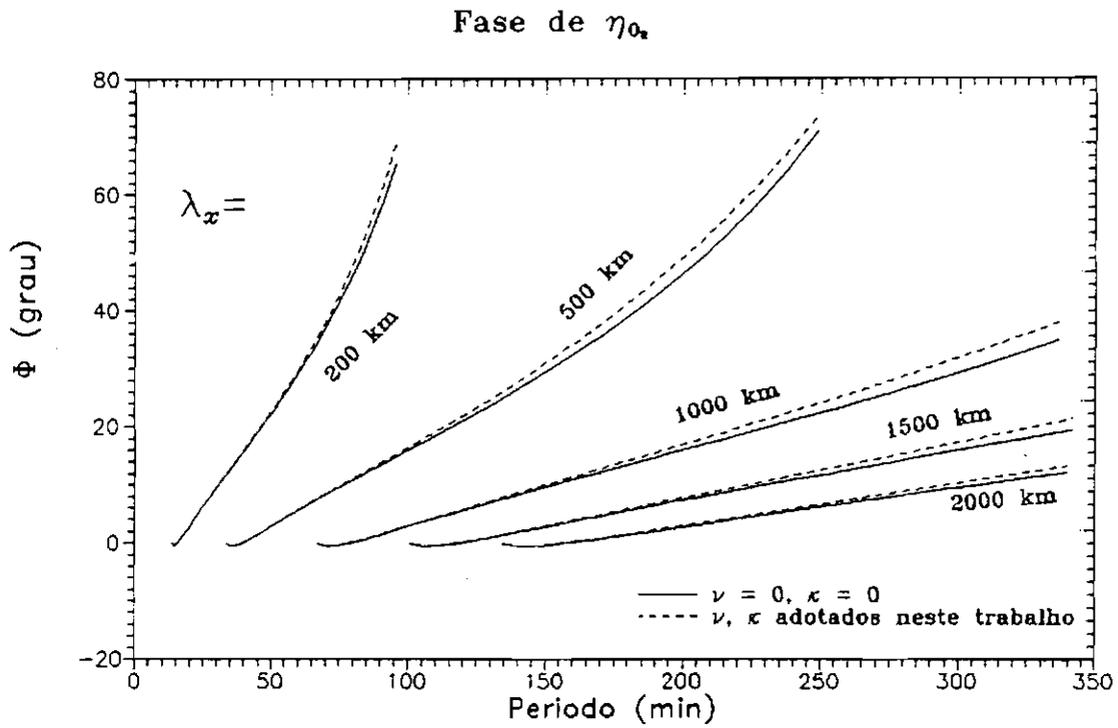


Fig. 7.20 - Os resultados das amplitudes (gráfico abaixo) e fases (acima) de $\eta_{0_2(b)}$ para um modelo de múltiplas camadas, considerando uma camada de emissão de $z_i = 88$ km e $z_s = 102$ km, em uma atmosfera com presença (linha tracejada) e ausência de efeitos difusivos (linha sólida), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km (na respectiva ordenação). O comprimento vertical é restrito a valores maiores do que 10 km.

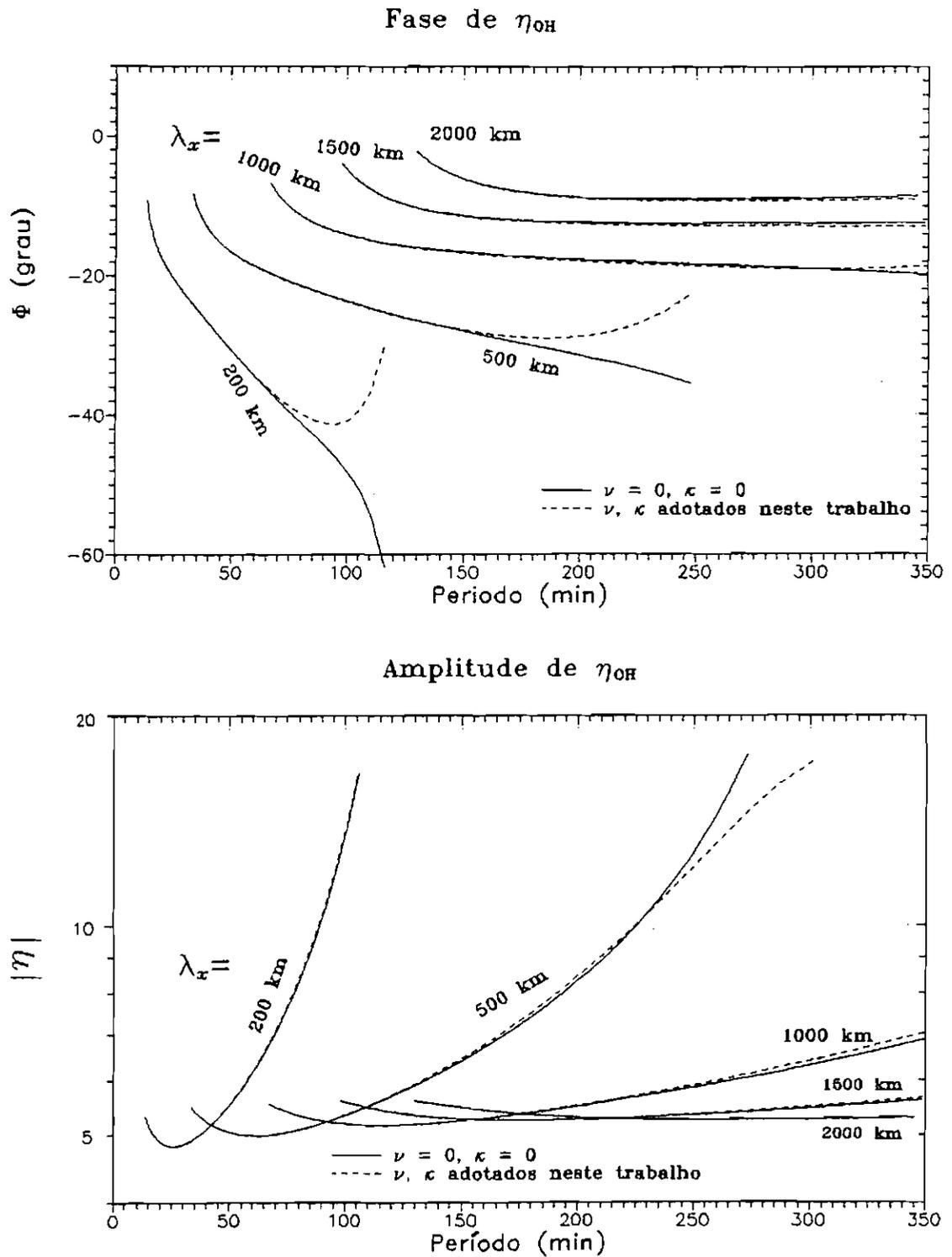


Fig. 7.21 - Os resultados das amplitudes (gráfico abaixo) e fases (acima) de η_{OH} para um modelo de múltiplas camadas, considerando uma camada de emissão de $z_i = 81$ km e $z_s = 95$ km, em uma atmosfera com presença (linha tracejada) e ausência de efeitos difusivos (linha sólida), usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km, 1000 km, 1500 km e 2000 km (na respectiva ordenação). O comprimento vertical é restrito a valores maiores do que 12 km.

7.5 - COMPARAÇÃO COM AS OBSERVAÇÕES

A teoria da interação entre as ondas de gravidade e o *airglow* apresentada neste trabalho mostra que os valores de η dependem, entre outros fatores, do período intrínseco da onda (deslocamento Doppler) e do comprimento de onda horizontal. Assim quando as comparações entre teoria e observação são empreendidas, necessita-se medir estes parâmetros simultaneamente com a taxa de emissão aparente e a temperatura rotacional das emissões de *nightglow*. Infelizmente, a maior parte das observações divulgadas na literatura científica, incluindo aqui as observações do MULTI2 apresentadas neste trabalho, são limitadas para testar uma teoria que explique qualquer valor de η observado, talvez, em muitos dos casos, pela própria limitação do experimento.

A identificação do período intrínseco requer o conhecimento da componente horizontal da velocidade do vento básico (u_0). Quando o vento impulsiona uma onda, o que implica em $u_0 > 0$, o período intrínseco é maior do que o período observado. Quando a direção do vento é oposta à direção da onda, acontece o inverso. A caracterização desta componente é de grande relevância na dinâmica das ondas de gravidade, desde que na região da mesopausa é muito freqüente encontrar velocidades de propagação de ondas de gravidade da mesma ordem que as velocidades dos ventos básicos (Moreels e Herse, 1977).

7.5.1 - Comparação com as Observações do MULTI2

Comparações da teoria desenvolvida neste trabalho com as observações proporcionadas pelo MULTI2, em diferentes épocas do ano (vide Capítulo 6), são mostradas nas Figuras 7.22 e 7.23, para as emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, respectivamente. Os dados são simplesmente locados em função do período da onda, para diferentes comprimentos de onda, $\lambda_x = 200$ km, 500 km e 1000 km, sem preocupar-se em variar os parâmetros do modelo a fim de obter um ajuste mais satisfatório. De fato, estas figuras oferecem um cotejo mais qualitativo do que quantitativo entre teoria e observação. As curvas teóricas nas figuras referem-se a uma atmosfera onde os efeitos difusivos *eddy* estão presentes ($\nu = 200 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, $\kappa = 100 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$) e incluem os efeitos da integração sobre a camada de emissão (modelo de múltiplas camadas).

Com relação às doze ondas de gravidade analisadas no Capítulo 6 para a emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, as diferenças entre os valores observados e cal-

culados de $|\eta|$ e Φ estão na maior parte dentro do erro experimental inerente às respectivas medidas, conforme exhibe a Figura 7.22. Em geral a concordância é melhor em períodos de onda mais longos. Um determinado grupo de ondas de período curto apresenta valores de $|\eta|$ em torno de 2, diferentemente dos valores limites proporcionados pelas curvas teóricas mostradas na Figura 7.22. Esta discrepância pode ser resolvida, em parte, variando o comprimento de onda horizontal entre os valores de 30 e 100 km e reduzindo-se a magnitude dos efeitos difusivos — neste caso, a tendência dos valores preditos de η poderia ser mascarada pelos efeitos de interferência. Faz-se necessário também investigar o comportamento de η relativo aos modos evanescentes (não incluídos na presente teoria). Neste caso é essencial conhecer o comprimento de onda horizontal dos modos de propagação observados, para poder distinguir entre ondas internas e evanescentes. Infere-se dos valores medidos de $|\eta|$, uma tendência crescente com o aumento do período da onda. A teoria prevê tal constatação, que depende particularmente do comprimento de onda horizontal. A fase Φ positiva e próxima a zero é comum à maior parte das medidas, conforme prediz a teoria; contudo estes valores mudam apreciavelmente com a variação da espessura da camada de emissão — ensaios numéricos mostram que quanto menos espessa é a camada de emissão, menores são os valores de Φ .

Para as oito ondas de gravidade associadas à emissão de OH^* (9-4) observadas pelo MULTI2, as amplitudes e fases de η também são razoavelmente consistentes com as predições teóricas, conforme exhibe a Figura 7.23, apesar da relativa escassez de medidas. Alguma discrepância também é verificada nos valores de η em períodos de onda mais curtos, tanto em $|\eta|$ quanto em Φ . As mesmas considerações anteriores podem ser reproduzidas aqui. Entretanto quaisquer pequenas diferenças entre teoria e observação em períodos de onda mais longos podem ser explicadas, se o comprimento de onda horizontal é alterado ou caso permita-se que a espessura da camada de emissão varie.

A tendência verificada de $|\eta_{\text{O}_2(b)}|$ crescer com o período da onda é da mesma maneira observada nos valores de $|\eta_{\text{OH}^*}|$, embora o limite superior de $|\eta|$ para a emissão de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ tenha sido levemente menor do que para a emissão de OH^* (9-4). No entanto, a diferença observada entre os valores de $\Phi_{\text{O}_2(b)}$ e Φ_{OH^*} é mais reveladora, caracterizando de uma vez por todas a resposta particular das variações nas constantes de tempo fotoquímicas de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e OH^* (9-4) frente à passagem de uma onda de gravidade. De uma maneira geral, a teoria desenvolvida neste trabalho consegue explicar estes resultados, embora seja essencial o conhecimento do comprimento de onda horizontal para uma discussão mais aprofundada entre teoria e observação.

Alguns dados da variabilidade nos dados de η proporcionados pelo experimento MULTI2 poderia ser atribuída ao deslocamento Doppler dos períodos de onda, conforme discutido anteriormente. O período usado na modelagem teórica de η é o período intrínseco τ , sendo assim, seria necessário conhecer a velocidade do vento básico para incluir o efeito Doppler e completar a comparação entre teoria e observação. Apesar de sua importância, este efeito não foi medido no presente estudo. Recentemente, Bird *et al.* (1991) mediram a componente da velocidade do vento básico ao longo da direção da onda, para algumas noites de observações de *nightglow* analisadas no trabalho de Zhang (1991). Por exemplo, considerando a noite de 11/12 de abril de 1991 (estudada naquele trabalho), a velocidade u , medida foi de -34 m s^{-1} . Esta componente tem o efeito de deslocar o modo de onda observado (308 min e $\lambda_x = 2705 \text{ km}$) em 20%, ou seja, 250 min é o período intrínseco da onda. Neste caso, a influência sobre o valor final de η calculado pelo modelo de Zhang (1991) foi desprezível ($< 2\%$).

Uma característica importante não investigada neste trabalho diz respeito à influência das variações nos parâmetros de difusividades térmica e de momentum sobre os valores de η , com o período da onda. O trabalho de modelagem mesosférica de Garcia e Solomon (1985) conclui que a turbulência mesosférica é mais ativa nos solstícios e menos ativa nos equinócios. Isto indica uma séria possibilidade de o parâmetro η vir a ter uma dependência sazonal. O trabalho recente de Hickey *et al.* (1992) examina as variações sazonais e latitudinais nos valores teóricos de η para a emissão de OH^+ , usando um modelo de estado básico (não perturbado), bi-dimensional e dependente do tempo, para a densidade dos constituintes atmosféricos minoritários, temperatura e difusividades *eddy*. O estudo, entre outros resultados, mostrou que as variações mais pronunciadas nos valores calculados de η ocorreram em períodos de onda mais curtos (entre 20 e 100 min), evidenciada no presente trabalho como a região mais discordante entre teoria e observação. Isto certamente adiciona um fator de complicação a mais nos refinamentos futuros dos modelos e observações destinados a estudar as ondas de gravidade a partir das medidas de *airglow*.

A natureza da excitação das ondas de gravidade é um assunto ainda em pesquisa, embora algumas fontes globais na atmosfera inferior são reconhecidamente importantes, tais como os efeitos orográficos, efeitos de cisalhamento nos ventos (*wind shear*) e a convecção troposférica (Lindzen, 1984). Em uma escala sinóptica, as nuvens cúmulos-nimbos poderiam contribuir com a variabilidade do espectro das ondas de gravidade na média atmosfera, conforme sugere Iara R. C. A. Pinto (comunicação pessoal). Neste sentido, um estudo da frequência de ocorrência de nuvens, a partir de dados meteorológicos das noites de observação, poderia fornecer alguma evidência sobre esta questão.

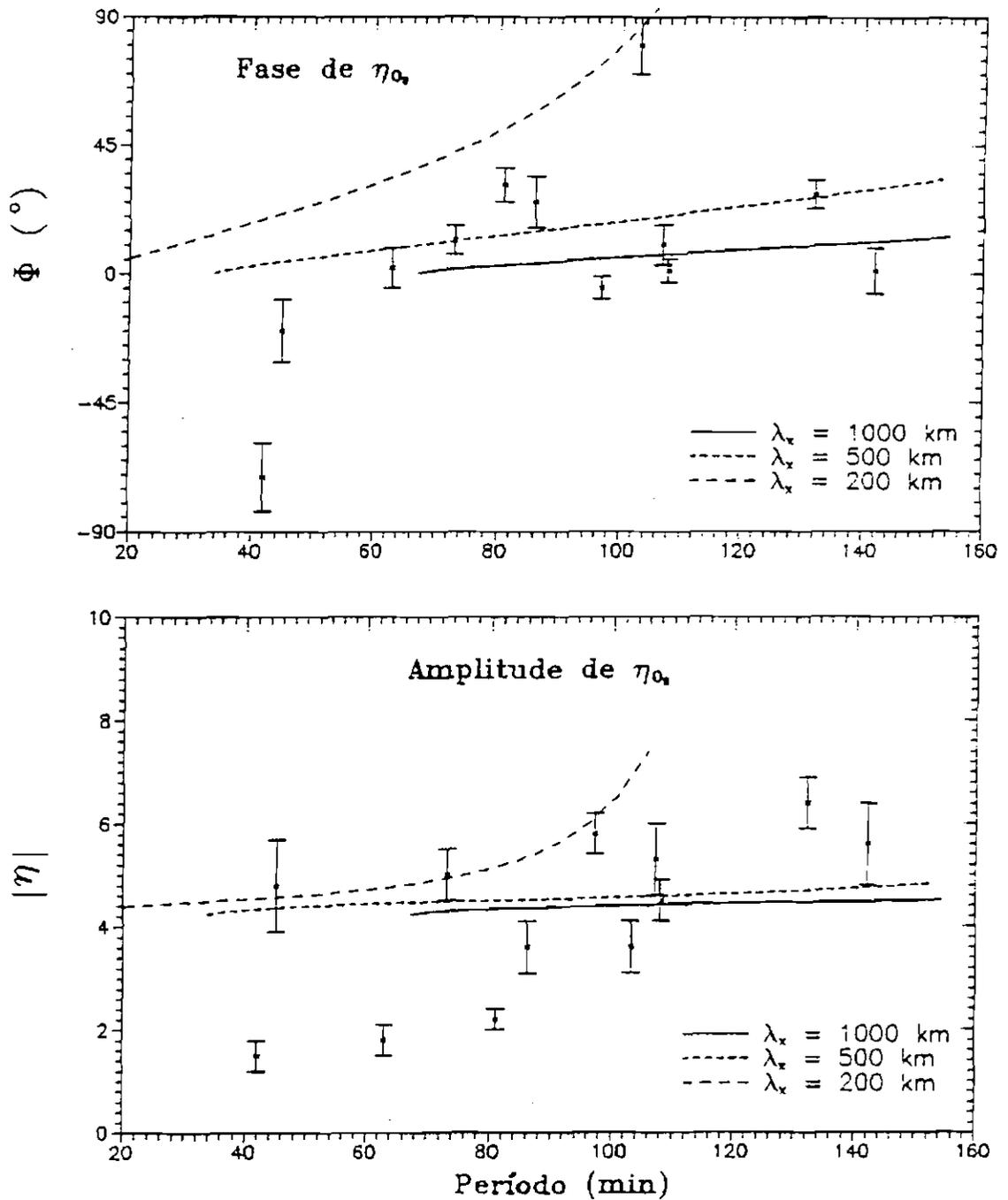


Fig. 7.22 - A comparação entre os resultados das amplitudes (gráfico abaixo) e fases (acima) de $\eta_{O_2(b)}$ inferidos das observações proporcionadas pelo MULTI2 e as predições teóricas do presente estudo. As curvas teóricas de η versus período da onda são relativas ao modelo de múltiplas camadas, em uma atmosfera com a presença dos efeitos difusivos, usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km e 1000 km. Os símbolos centrais e as barras de erro associadas referem-se às observações de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$.

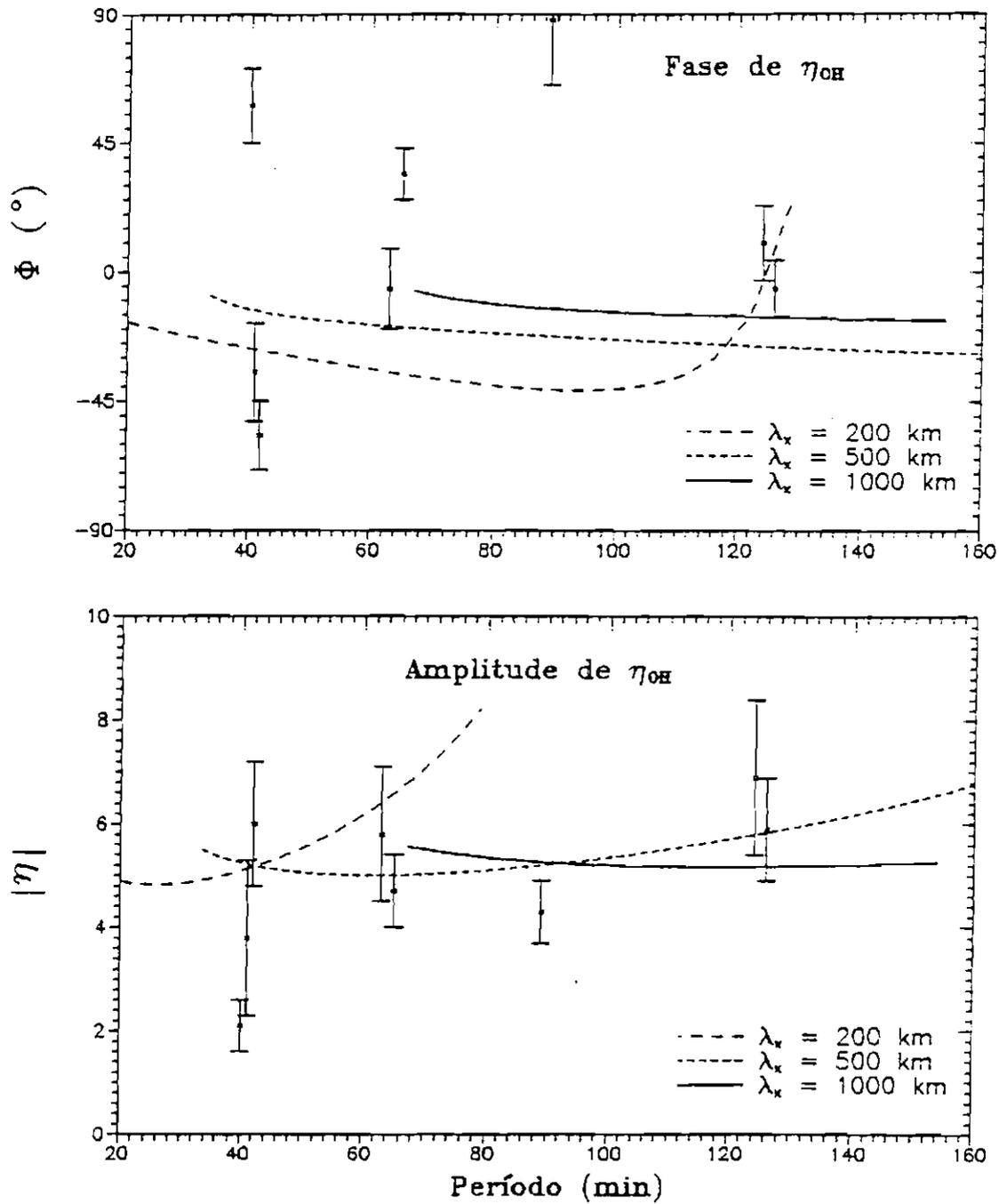


Fig. 7.23 - A comparação entre os resultados das amplitudes (gráfico abaixo) e fases (acima) de η_{OH^*} inferidos das observações proporcionadas pelo MULTI2 e as predições teóricas do presente estudo. As curvas teóricas de η versus período da onda são relativas ao modelo de múltiplas camadas, em uma atmosfera com a presença dos efeitos difusivos, usando os seguintes $\lambda_x = 200$ km, 500 km e 1000 km. Os símbolos centrados e as barras de erro associadas referem-se às observações de OH^+ (9-4).

7.5.2 - Comparação com as Observações de Viereck e Deehr

Um conjunto numeroso de dados das emissões de *airglow* de $\text{OH}^*(6-2)$ e $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ foi obtido por Viereck e Deehr (1989) em Fairbanks, E.U.A. (64°N , 145°W) e Longyearbyen, Noruega (78°N , 16°E). A técnica de análise usada para correlacionar as flutuações de intensidade e temperatura — e calcular $|\eta|$ e Φ — foi a estimativa da densidade espectral-cruzada, sendo o nível de significância $> 0,5$, testado através do cálculo da coerência quadrática.

Uma comparação dos resultados da teoria desenvolvida neste trabalho com as observações de η deduzidas de $\text{OH}^*(6-2)$ é apresentada na Figura 7.24. Os dados de η (asteriscos) são locados em função do período; e as curvas teóricas empregam as difusividades adotadas no trabalho, sem preocupar-se em variar os parâmetros do modelo de estado básico dos constituintes atmosféricos.²² Os valores medidos de $|\eta|$ variam de $\approx 2,6 - 6,2$, com valores maiores em períodos mais longos. Φ é, em geral, negativo e próximo a zero. Em períodos de onda curtos, os valores de $|\eta|$ menores do que ≈ 3 poderiam ser produzidos pelas ondas evanescentes. Infelizmente a estrutura horizontal de cada modo de onda não foi observada. Os valores medidos de $|\eta|$ exibem uma tendência de crescimento com o período da onda crescente, consistente com as predições teóricas para as ondas de gravidade internas.

Os valores observados de $|\eta|$ para a emissão de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, proporcionados por Viereck e Deehr (1989), encontram-se entre $\approx 1 - 6$, apresentando valores maiores em períodos mais longos, o que concorda, em parte, com as predições teóricas do presente estudo. Já as observações das fases correspondentes apresentam algumas dificuldades interpretativas. A fase Φ é $\approx 180^\circ$, com alguns valores espalhados entre $\pm 90^\circ$, em períodos de onda menores do que 2 horas; e $\approx 0^\circ$, em períodos de onda maiores. Os resultados de Φ do presente modelo difere consideravelmente das observações em períodos de onda curtos. Neste caso é essencial o conhecimento do comprimento de onda horizontal para especular sobre a predominância ou não dos modos evanescentes nesta região auroral (Zhang, 1991).

²²Deve-se ressaltar que o cálculo de η para a banda (6-2) pode diferir levemente dos resultados obtidos neste estudo para a banda (9-4), especialmente em períodos de onda mais longos, visto que o mecanismo fotoquímico de excitação da banda (6-2) exige a consideração de um modelo apropriado de desativação vibracional (vide Seção 3.3).

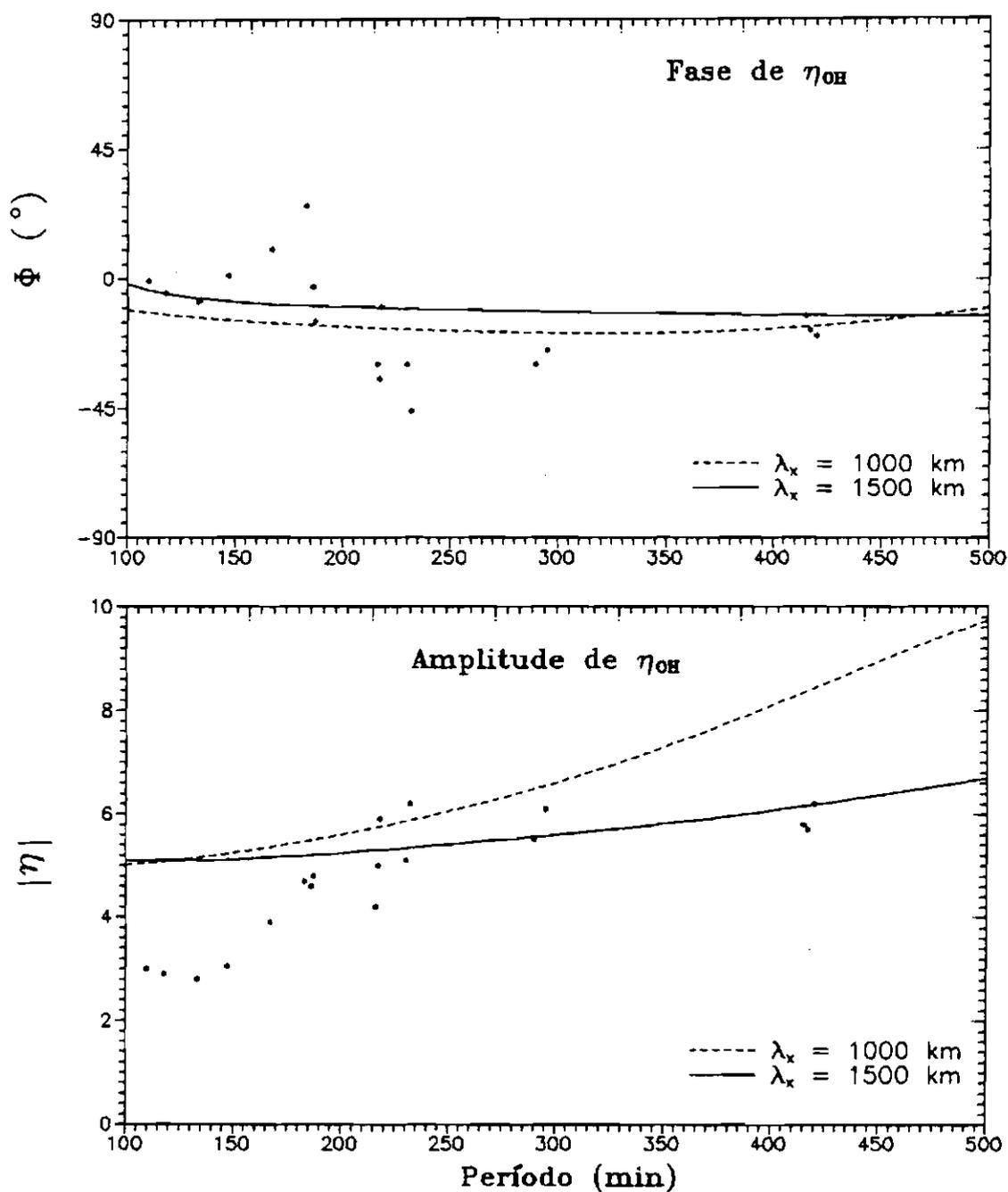


Fig. 7.24 - A comparação entre os resultados de η_{OH} obtidos das observações de Viereck e Deehr (1989) e as predições teóricas do presente estudo. As curvas teóricas de η versus período da onda são relativas ao modelo de múltiplas camadas, em uma atmosfera com a presença dos efeitos difusivos, usando os seguintes $\lambda_x = 1000$ km e 1500 km. Os símbolos centrados referem-se às observações de OH^* (9-4).

7.5.3 - Comparação com as Observações de Zhang

As medidas das emissões de *airglow* de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, efetuadas durante a campanha AIDA (acrônimo de *Arecibo Initiative for Dynamics of the Atmosphere*) em 1989 (Porto Rico $17.6^\circ N$, $66.5^\circ W$), foram analisadas e discutidas na tese de PHD de Zhang (1991). Usando um imageador monocromático (câmara CCD), tornou-se possível medir as variações horizontais na camada de *airglow*, monitorar e quantificar a propagação de estruturas de *airglow*. As velocidades dos ventos também eram disponíveis. A técnica de análise usada para correlacionar as flutuações de B e T_m — e calcular η — foi o método do periodograma de Lomb-Scargle (extensão do algoritmo da FFT para dados não igualmente espaçados, analisada, por exemplo, em Press e Teukolsky, 1988).

Onze modos de propagação (ondas de gravidade internas) observados por Zhang (1991) estão listados na Tabela 7.3. Os valores de $\eta_{O_2(b)}$ observados estão impressos lado a lado com os resultados de $\eta_{O_2(b)}$ da teoria desenvolvida neste trabalho. A diferença entre os valores de $|\eta|$ teóricos e observados é inferior (em módulo) a 20%; os valores de Φ , no entanto, são um pouco mais discrepantes, embora a diferença não seja superior a 34° . Em suma, a teoria parece concordar bem com esta coleção de dados.

TABELA 7.3 - COMPARAÇÃO ENTRE OS VALORES DE $\eta_{O_2(b)}$ OBSERVADOS POR ZHANG (1991) E PREDITOS PELA TEORIA USADA NESTE TRABALHO

Período (min)	λ_z (km)	$ \eta $ (obs.)	$\Phi(^{\circ})$	u_0 (m/s)	$ \eta $ (teórico)	$\Phi(^{\circ})$
46	228	4,5	2	+20	4,6	18
80	1040	4,5	0	-15	4,2	4
82	456	5,2	0	+0	4,4	20
106	1795	4,0	0	+0	4,4	0
126	774	3,5	1	+15	4,3	18
132	505	5,0	0	-20	4,7	34
138	1296	4,6	0	+0	4,3	10
150	1497	4,8	0	+0	4,3	8
162	890	4,8	0	+0	4,4	21
278	2896	3,5	0	+14	4,2	8
308	2705	5,5	7	-34	4,3	11

7.6 - COMPARAÇÃO COM A TEORIA SEMI-LAGRANGIANA DE HINES E TARASICK

Hines e Tarasick (1987, 1989) usaram uma descrição alternativa semi-Lagrangiana em um sistema de referência que translada-se verticalmente sobre a camada de emissão na presença de uma onda de gravidade. O método tem a virtude de prescindir da altitude da camada, desde que B e T_{in} são resultantes de integrações verticais através da camada de emissão inteira. Entretanto, sua dedução matemática é engenhosa e impregnada de aproximações (uma crítica sobre a formulação semi-Lagrangiana é apresentada por Isler *et al.*, 1991). Mostrou-se naquele estudo que se a camada emissora é isotérmica, então:

$$\eta^c = \frac{B'/B_0}{T_{in}^c/T_{in}^0} = (A - \mu - i\nu)(\gamma - 1)^{-1}, \quad (7.90)$$

onde as quantidades μ e ν são funções da frequência intrínseca e do comprimento de onda da perturbação, sendo, no caso das ondas de gravidade internas, expressas por:

$$\mu = \frac{1 - \gamma/2 + (1 - \Omega^2/k_x^2 C_0^2)\Omega^2 C_0^2/g^2}{1 - \Omega^4/k_x^2 g^2},$$

$$\nu = \frac{-\gamma k_z H_0}{1 - \Omega^4/k_x^2 g^2};$$

A é uma função da fotoquímica do *airglow*²³; e o supra-escrito (^c) indica $T = \text{const.}$.

Os trabalhos posteriores de Tarasick e Shepherd (1991, 1992) investigaram a faixa de valores do parâmetro A , em função da altitude, para as emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(v')$, concluindo que A variava com a altitude apenas em extensões bastante limitadas.

Usando, então, o mesmo modelo de estado básico dos constituintes atmosféricos descrito na Seção 7.4, determina-se, de acordo com as equações de Tarasick e Shepherd (1991) (equação 29) e Tarasick e Shepherd (1992) (equação 49), $A_{O_2(b)} = 1,76$ (no pico de emissão) e $A_{OH^*} = 1,85 + 0,11i$ (também no pico de emissão).

A equação (7.90), enfim, pode ser calculada numericamente e comparada com a descrição Euleriana seguida neste trabalho. A Figura 7.25 mostra os

²³O símbolo original χ , usado para designar o termo de fotoquímica na teoria de Hines e Tarasick (1989), foi mudado para A , apenas para não confundir com o fator de polarização χ , definido neste trabalho.

valores das amplitudes e fases de η para as emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, calculadas para as duas descrições — a linha sólida refere-se à análise apresentada neste estudo; enquanto que, a linha tracejada, à análise semi-Lagrangiana de Hines e Tarasick (1987) —, variando a estrutura horizontal da onda (λ_x). Apesar de usar a mesma atmosfera, os dois métodos diferem bastante entre si, especialmente nos resultados de Φ . A teoria semi-Lagrangiana prediz valores de Φ muito elevados para a maioria das ondas de gravidade interna, os quais, em geral, não são observados. Especialmente para as amplitudes, a concordância entre os dois métodos de análise melhora em períodos de onda longos e λ_x crescentes. Zhang (1991), usando uma fotoquímica simplificada para emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, demonstra teoricamente que a diferença no cálculo final da taxa de emissão aparente (B), entre as duas descrições, repousa em um termo de fase $-ik_z$, o que explica, em parte, o motivo de a teoria semi-Lagrangiana produzir valores muito altos para Φ .

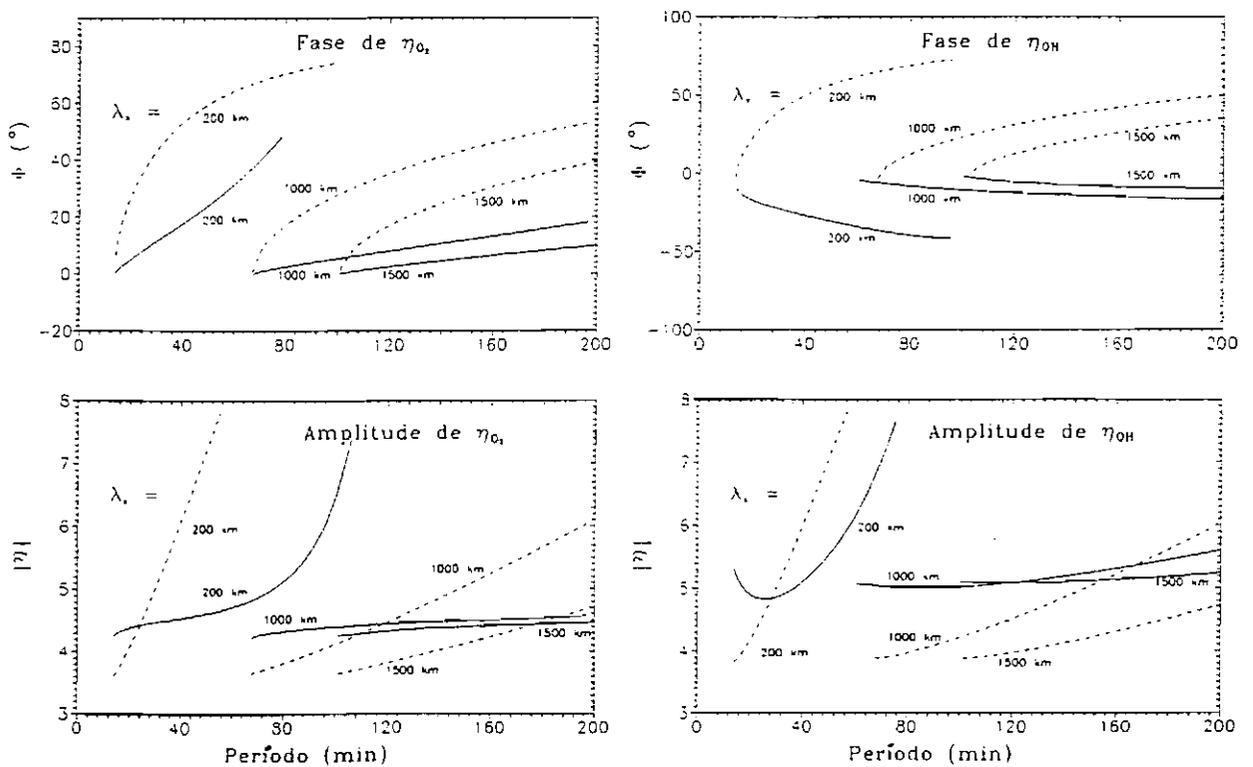


Fig. 7.25 - Comparação dos resultados de η , referente às emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, calculados através da descrição Euleriana apresentada neste trabalho (linha sólida) e da descrição semi-Lagrangiana desenvolvida por Hines e Tarasick (1987) (linha tracejada). As curvas foram obtidas para $\lambda_x = 200$ km, 1000 km e 1500 km.

CAPÍTULO 8

CONCLUSÃO

As medidas fotométricas realizadas pelo MULTI2, desde longa data, têm identificado irregularidades de natureza quase-periódicas, e correlacionadas, nas intensidades e temperaturas das emissões observadas no *nightglow* em baixas latitudes.

Um dos objetivos de estudar as flutuações temporais nas emissões de *airglow* da região da mesopausa é a identificação e a avaliação dos agentes que provocam estas variações. Discutiu-se, neste trabalho, através das flutuações observadas na taxa de emissão aparente (B) e temperatura rotacional (T_m) do *airglow*, a possibilidade de que estas flutuações sejam devidas aos efeitos da propagação de ondas de gravidade internas sobre as emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$.

A razão de Krassovsky η incumbiu-se de quantificar a correlação entre B e T_m , não somente por motivos históricos, mas, sobretudo, pelo fato de η ser uma quantidade que independe da amplitude de flutuação da onda, o que lhe confere bastante utilidade nas comparações com resultados provenientes de outros experimentos.

Desenvolveu-se, em paralelo, um estudo da interação de natureza complexa entre as ondas de gravidade internas e a camada de emissão de *airglow* das emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$, com a finalidade de determinar resultados teóricos para η e, enfim, compará-los com os valores medidos.

Logo abaixo, apresenta-se um sumário dos resultados alcançados na coleta e análise das observações de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$:

- A metodologia adotada neste trabalho para converter as medidas fotométricas das emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$ em temperatura rotacional e taxa de emissão exigiu, inicialmente, a construção do espectro teórico, para cada uma das emissões, com o objetivo de identificar e calcular a contribuição de cada linha rotacional ao espectro observado no *nightglow*.
- O procedimento empregado na calibração da sensibilidade absoluta do fotômetro seguiu o trabalho experimental de Yano e Kiyama (1975). Em particular, o uso de dois difusores apresentou a vantagem de reduzir o espaço

ocupado pela experiência, o que permitiu controlar melhor a influência do meio externo.

- De acordo com os critérios (de rejeição de dados) preliminares utilizados no processamento das medidas do MULTI2, escolheu-se 29 noites, de outubro de 1989 a setembro de 1991. A avaliação prévia mostrou que o valor médio noturno de B para as emissões de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$ variou entre 389 – 958 R e 333 – 764 R, respectivamente; e o valor médio da temperatura rotacional, entre 158 – 186 K e 194 – 210 K, respectivamente.
- O método da entropia máxima (MEM), em conjunto com o método de regressão linear múltipla, foi a técnica de análise espectral aplicada às séries temporais das flutuações relativas de B e T_m . Achada a coincidência espectral entre as séries, efetuava-se a determinação de η para $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $OH^*(9-4)$. Este procedimento mostrou-se bastante eficaz, embora fosse desejável uma análise comparativa com os métodos mais freqüentemente empregados nesta área de pesquisa, como por exemplo a estimativa da densidade espectral cruzada entre B e T_m (Sivjec *et al.* 1987).
- Com relação à emissão de $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, doze eventos com ondas quase-monocromáticas foram analisados, possuindo períodos aparentes entre 42 min e 142 min. As amplitudes das flutuações relativas de B permaneceram entre 0,02 e 0,2; enquanto que as amplitudes das flutuações relativas de T_m foram, em média, um terço menores. Os valores obtidos para a amplitude de η variaram entre 1,5 e 6,4, exibindo uma certa tendência de crescimento em períodos de onda mais longos. A defasagem medida entre as flutuações relativas de B e T_m foram, em geral, positivas e próximas a zero, ou seja a temperatura medida precede a taxa de emissão.
- No caso da emissão de $OH^*(9-4)$, oito eventos com ondas quase-monocromáticas foram analisados, com períodos aparentes entre 41 min e 126 min. As amplitudes das flutuações relativas de B permaneceram entre 0,05 e 0,15; enquanto que as amplitudes das flutuações relativas de T_m foram, em média, um quarto menores. Elas foram caracterizadas pelos valores de $|\eta|$ na faixa de 2,1 a 6,9 e pelos valores de Φ entre -57° e 88° .
- Não foi encontrada uma possível correlação espectral, com respeito a eventos ondulatórios, entre as duas emissões de *airglow* analisadas neste trabalho, exceto, porém, na noite de 21/22 de junho de 1990 (período de aproximadamente 90 min). Isto sugere que a resposta de cada emissão à passagem de ondas de gravidade depende severamente do fluxo básico ambiente, cujo efeito principal é o deslocamento Doppler nas freqüências de onda. Os mecanismos

de saturação, que agem de modo a limitar ou reduzir a amplitude das ondas de gravidade na região da média atmosfera, podem também complicar uma interpretação comparativa entre os espectros medidos. Neste sentido, uma quantidade significativamente maior de eventos com ondas monocromáticas, pesquisados através das medidas de *airglow*, faz-se necessário.

O modelo desenvolvido neste trabalho segue, basicamente, a mesma orientação do modelo Euleriano proposto por Schubert *et al.* (1991) para tratar com as flutuações em $\text{OH}^*(v)$ induzidas por ondas de gravidade. O presente estudo generaliza a análise de Schubert *et al.* (1991), aplicando-a às emissões de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $\text{OH}^*(9-4)$. Diferencia-se deste, principalmente, pelo tratamento mais detalhado dos aspectos fotoquímicos que caracterizam as emissões de *airglow* — inclusão dos efeitos de *quenching*.

Em linhas gerais, os fatores de polarização (f_1, f_2, f_3, f_6 , e χ) bem como os resultados finais de η , exibem expressivas mudanças com a presença dos efeitos difusivos atmosféricos, impondo uma acentuada dependência com a estrutura horizontal da onda de gravidade, especialmente em períodos de onda longos, ou, equivalentemente, em comprimentos de onda verticais curtos. Além disso a difusão *eddy* suaviza os efeitos de interferência, associados à espessura vertical de integração não-nula da camada de emissão. A inclusão dos efeitos de *quenching* revelaram-se importantes, principalmente à emissão de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$, elevando em aproximadamente 1 km a altitude do pico de emissão, e conseqüentemente, alterando os valores calculados de $\eta_{\text{O}_2(b)}$.

A teoria referente à emissão de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ prediz valores de $|\eta|$ na faixa de 4,2 a 6,0 e Φ entre 0° e 60° , para a maior parte das ondas de gravidade internas. Com relação à emissão de $\text{OH}^*(9-4)$, a teoria aponta para uma faixa de valores bem mais ampla para $|\eta|$, de 4,8 a 18, e Φ entre -60° e 0° . Os valores de η mostraram uma importante dependência com o estado básico dos constituintes atmosféricos e com a extensão vertical da camada de emissão, especialmente para os resultados de Φ . Neste caso seria interessante adotar como dados de entrada à teoria das flutuações dos constituintes minoritários um modelo mesosférico de estado básico autoconsistente. Isto produziria valores teóricos para η dependentes da localização geográfica das observações.

As discussões anteriores (Capítulo 7) mostram que as flutuações observadas no *airglow* de $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ e $\text{OH}^*(9-4)$ podem ser interpretadas em termos da propagação vertical ascendente das ondas de gravidade internas, mais notavelmente em períodos de onda longos (> 1 hora). A distinção entre os modos de

propagação e evanescente, o que exige a identificação observacional do comprimento de onda horizontal, parece fundamental para explicar os baixos valores medidos de $|\eta|$ em períodos de onda mais curtos.

O presente estudo ressalta a importância de realizarem-se medidas conjuntas dos parâmetros de onda e da razão η . Recomenda-se para isso observações fotométricas simultâneas de B e T_m em ao menos três pontos (não colineares) no céu, embora seja preferível o uso dos sistemas imageadores atuais, que proporcionam uma grande quantidade de amostras e possibilitam, com grande precisão, monitorar a propagação da estrutura horizontal das ondas. A identificação da frequência intrínseca requer, também, a disponibilidade de medidas da velocidade do vento básico, desde que o deslocamento Doppler pode ser importante nestas altitudes. Sem estas informações a teoria dificilmente conseguirá remover as ambiguidades existentes, e pouco ajudará a esclarecer os detalhes da interação entre as ondas de gravidade e a camada de *airglow*.

Uma questão muito importante a ser explorada em trabalhos futuros diz respeito à validade da superposição linear de ondas monocromáticas — induzindo flutuações na taxa de emissão e temperatura — representar as correspondentes perturbações nas densidades das espécies atmosféricas. A violação desta suposição pode ser traduzida pela presença de harmônicos de ordem superior de uma frequência de onda fundamental nos espectros de potência das flutuações de B e T_m , ou seja, muitos dos picos presentes em tais espectros poderiam ser oriundos da consequente não-linearidade da resposta da camada de *airglow*, ao invés do comportamento dinâmico real da atmosfera frente à passagem de uma onda de gravidade. Uma análise comparativa da contribuição desempenhada pelos termos de ordem superior às flutuações da densidade atmosférica e da taxa de emissão (referentes à descrição Euleriana), adicionada aos resultados de um experimento que envolvesse medidas fotométricas de solo, em simultaneidade com medidas das flutuações de densidade atmosférica via radar ou lidar, poderia examinar este aspecto crucial para os futuros refinamentos teóricos e observacionais que requer esta área de pesquisa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Akaike, H. Fitting autoregressions for prediction. *Ann. Inst. Statist. Math.*, **21**(1):243-247, 1969.
- Andersen, N. On the calculation of filter coefficients for maximum entropy spectral analysis. *Geophys.*, **39**(1):69-72, 1974.
- Armstrong, E. B. The influence of a gravity wave on the airglow hydroxyl rotational temperature at night. *J. Atmos. Terr. Phys.*, **37**(s.f.):1585-1591.
- Baker, D. J.; Stair Jr., A. T. Rocket measurements of the altitude distributions of the hydroxyl airglow. *Phys. Scripta*, **37**(s.f.):611- , 1988.
- Barth, C. A. Three-body reaction. *Ann. Géophys.*, **20**(s.f.):182-196, 1964.
- Bates, D. R. Excitation of 557.7 nm OI line in nightglow. *Planet. Space Sci.*, **9**(9):883-889, 1988 a.
- Excitation and quenching of the oxygen bands in the nightglow. *Planet. Space Sci.*, **36**(9):875-881, 1988 b.
- Bates, D. R.; Nicolet, M. The photochemistry of atmospheric water vapor. *J. Geophys. Res.*, **55**(s.f.):301-325, 1950.
- Beer, T. *Atmospheric Waves*. New York, Adam Hilger, 1975.
- Berthier, P. Étude spectrophotométrique de la luminescence nocturne des bandes des molécules OH et O₂ atmosphériques. *Ann. Géophys.*, **12**(s.f.):113-120, 1956.
- Bevington, P. R. *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. New York, McGraw-Hill Book Company, 1969.
- Brandt, S. *Statistical and Computational Methods in Data Analysis*. Amsterdam, North-Holland, 1970.
- Burg, J. P. Maximum entropy spectral analysis. Trabalho apresentado. *Annual International Meeting of Society of Exploration Geophysics*, 37^o, Oklahoma, 1967.
- Campbell, I. M.; Gray, C. N. Rate constants for O(³P) recombination and association with N(⁴S). *Chem. Phys. Lett.*, **8**(s.f.):259-263, 1973.
- Chapman, S. Some phenomena of upper atmosphere. *Proc. Royal Soc. London*, **A132**(s.f.):353-374, 1931.

- Chamberlain, J. W. *Physics of the aurora and airglow*. New York, Academic Press, 1961.
- Chamberlain, J.W.; Hunten, D. M. *Theory of planetary atmospheres*. London, Academic Press, 1987.
- Clemesha, B. R.; Takahashi, H.; Batista, P. P. Mesopause temperatures at 23°S. *J. Geophys. Res.*, **95**(D6):7677-7681, 1990.
- Clemesha, B. R.; Takahashi, H.; Batista, P. P.; Sahai, Y.; Simonich, D. M. The temperature dependence of airglow emissions from the upper mesosphere and lower thermosphere. *Planet. Space Sci.*, **39**(10):1397-1404, 1991.
- Coxon, J. A.; Foster, S. C. Rotational analyses of hydroxyl vibration-rotation emission bands: molecular constants for OH $X^2\Pi$, $6 \leq v \leq 10$. *Can. J. Phys.*, **60**(1):41-50, 1982
- Demore, W. B.; Margitan, J. J.; Molina, M. J.; Watson, R. T.; Golden, D. H.; Hampson, R. F.; Kurylo, M. J.; Howard, C. J.; Ravishankara, A. R. Chemical kinetics and photochemical data for use in stratospheric modeling. Evaluation No. 7, *JPL Pub.* 85-37, 217-274, 1985.
- Eather, R.H.; Reasoner, D.L. Spectrophotometry of faint light sources with a tilting-filter photometer. *Appl. Optics*, **8**(2):227-242, 1969.
- Fagundes, P. R.; Takahashi, H.; Sahai, Y.; Teixeira, N. R. Observações simultâneas das emissões OI 5577 Å, O₂ A (0-1), Na D 5893 Å, OH (9-4) e das temperaturas rotacionais T O₂ e T OH na alta atmosfera. *Rev. Bras. Geofis.*, **9**(1):77-83, 1991.
- Fritts, D. C. Gravity waves saturation in the middle atmosphere: A review of theory and observations. *Rev. Geophys.*, **22**(3):275-308, 1984.
- Gobbi, D.; Takahashi, H.; Clemesha, B. R.; Batista, P. P. Equatorial atomic oxygen profiles derived from rocket observations of OI 557.7 nm airglow emission. *Planet. Space Sci.*, **40**(6):775-781, 1992.
- Greer, R. G. H.; Murthag, D. P.; Mcdade, I. C.; Dickinson, P. H. G.; Thomas, L.; Jenkins, D. B.; Stegman, J.; Llewellyn, E. J.; Witt, G.; Mackinnon, D. J.; Williams, E. R. ETON 1: A data base pertinent to the study of energy transfer in the oxygen nightglow. *Planet. Space Sci.*, **34**(9):771-788, 1986.
- Harris, F. R. The atmospheric system of O₂ in nightglow. *EOS*, **64**(s.f.):779-781, 1983.
- Haykin, S. *Nonlinear methods of spectral analysis*. New York, Spring-Verlag, 1979.

- Hecht, J. H.; Walterscheid, R. L. Sivjee, G. G.; Christensen, A. B.; Pranke, J. B. Observations of wave-driven fluctuations of OH nightglow emission from Sondre Stromfjord, Greenland. *J. Geophys. Res.*, **92**(A6): 6091-6099, 1987.
- Hedin, A. E. MSIS-86 thermospheric model. *J. Geophys. Res.* **92**(A5):4649-4662, 1987.
- Herzberg, G. *Molecular spectra and molecular structure.* London, D. Van Nostrand, 1950.
- Hickey, M. P. Effects of eddy viscosity and thermal conduction and coriolis forces in the dynamics of gravity wave driven fluctuations in the OH nightglow. *J. Geophys. Res.*, **93**(D4):4077-4088, 1988a.
- Wavelength dependence of eddy dissipation and coriolis force in the dynamics of gravity wave driven fluctuations in the OH nightglow. *J. Geophys. Res.*, **93**(D4):4089-4101, 1988b.
- Hickey, M. P.; Schubert, G.; Walterscheid, R. L. Seasonal and latitudinal variations of gravity wave-driven fluctuations in OH nightglow. *J. Geophys. Res.*, **97**(A10):14 911-14 922, 1992.
- Hill, E.; Vanvleck, J. H. *Phys. Rev.* , **32**(s.f.):250-254, 1928.
- Hines, C. O. Earlier days of gravity waves revisited. *Pure Appl. Geophys.*, **130**(s.f.): 151-170, 1989.
- Hines, C. O. Internal atmospheric gravity waves at ionospheric heights. *Can. J. Phys.*, **38**(s.f.):1441-1481, 1960.
- Hines, C. O.; Tarasick, D. W. On the detection and utilization of gravity waves in airglow studies. *Planet. Space Sci.*, **35**(7):851-866, 1987.
- Hocking, W. K. Turbulence in the altitude region 80-120 km. *Map Handbook - Middle Atmosphere Program*, **16**(s.f.):290-304, 1985.
- Isler, J. R.; Tuan, T. F.; Picard, R. H.; Makhlof, U. On the nonlinear response of airglow to linear gravity waves. *J. Geophys. Res.*, **96**(A8):14141-14152, 1991.
- Kane, R.P.; Sahai, Y.; Teixeira, N. R. Maximum entropy spectral analysis of total ozone, *Pageoph*, **122**(s.f.):747-762, 1985.
- Kane, R. P. Power spectrum analysis of solar and geophysical parameters. *J. Geomagn. Geoelectr.*, **29**(s.f.):471-495, 1977.
- Kato, S. *Dynamics of the upper atmosphere.* New York, D. Reidel, 1980.

- Kaveh, M.; Lippert, G. A. An optimum tapered Burg method for linear prediction and spectral analysis. *IEEE Trans. Acoustics, Speech and Sig. Proc. ASSP*, **31**(s.f.):438-444, 1983.
- Kaye, J. A. On the possible role of the reaction $O + HO_2 \rightarrow OH + O_2$ in OH airglow. *J. Geophys. Res.*, **93**(A2):285-293, 1988.
- King, G. W. *Spectroscopy and molecular structure*. New York, Holt, Rinehart and Winston, 1964.
- Klenerman, D.; Smith, I. W. M. Infrared chemiluminescence studies using a SISAM spectrometer—reactions producing vibrationally excited OH. *J. Chem. Soc. Farad. Trans.*, **83**(s.f.):229-237, 1987.
- Krassovsky, V. I. Infrasonic variations of OH emission in the upper atmosphere. *Ann. Géophys.*, **28**(4):739-746, 1972.
- Krassovsky, V. I.; Shefov, N. N.; Yarin, V. I. Atlas of the airglow spectrum 3000 – 12400 Å. *Planet. Space Sci.*, **9**(s.f.):883-919, 1962.
- Krassovsky, V. I.; Potapov, B. P.; Semenov, A. I.; Shagaev, M. V.; Shefov, N. N.; Sobolev, V. G.; Toroshelidze, T. I. Internal gravity waves near the mesopause and the hydroxyl emission. *Ann. Géophys.*, **33**(3):347-356, 1977.
- Krupenie, P. H. The spectrum of molecular oxygen. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **1**(2):423-487, 1972.
- Kulkarni, P.V.; Sanders, C.L. Use of radioactivated light source for the absolute calibration of two-colour night airglow photometer. *Planet. Space Sci.*, **12**(s.f.):189-194, 1964.
- Lacoss, R. T. Data adaptive spectral analysis methods. *Geophys.*, **36**(1):661-675, 1971.
- Lindzen, R. S. *Dynamics of the Middle Atmosphere*. Tokyo, Ed. Terra, 1984.
- Lindzen, R. S. *Dynamics in Atmospheric Physics*. Cambridge, Cambridge Univ., 1990.
- Lopez-Moreno, J. J.; Rodrigo, R.; Moreno, F.; Lopez-Puertas, M.; Molina, A. Altitude distribution of vibrationally excited states of atmospheric hydroxyl at levels $v = 2$ to $v = 7$. *Planet. Space Sci.*, **35**(9):1029-1035, 1987.
- Martin, L. R.; Cohen, R. B.; Schatz, J. R. Quenching of laser induced fluorescence of $O_2(b^1\Sigma_g^+, 0-1)$ by O_2 and N_2 . *Chem. Phys. Lett.*, **41**:394-399, 1976.

- McDade, I. C.; Llewellyn, E. J. Kinetic parameters related to sources and sinks of vibrationally excited OH in the nightglow. *J. Geophys. Res.*, **92**(A7):7643-7650, 1987.
- McDade, I. C.; Llewellyn, E. J. Mesospheric oxygen atom densities inferred from nightglow OH Meinel band emission rates. *Planet. Space Sci.*, **36**(9):897-906, 1988.
- McDade, I. C.; Murtagh, D. P.; Greer, R. G. H.; Dickinson, P. H. G.; Witt, G.; Stegman, J.; Llewellyn, E. J.; Thomas, L.; Jenkins, D. B. ETON 2: Quenching parameters for the proposed precursors of $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ and $O(^1S)$ in the terrestrial nightglow. *Planet. Space Sci.*, **34**(9):789-800, 1986.
- McDade, I. C. The altitude dependence of the OH ($X^2\Pi$) vibrational distribution in the nightglow: some model expectations. *Planet. Space Sci.*, **39**(9):1029-1035, 1991.
- Meinel, A. B. OH emission bands in the spectrum of the night sky (1). *Astrophys. J.*, **111**(s.f.):555-564, 1950.
- Meriwether, J. W. The photochemistry of nightglow emissions of the mesopause region. *J. Geophys. Res.*, **94**(D12):14 629-14 637, 1989.
- Mies, F. H. Calculated vibrational transition probabilities of OH ($X^2\Pi$). *J. molec. Spectrosc.*, **53**(1):150-188, 1974.
- Mohan, H.; Shardanand *Free radical OH molecule of astrophysical and aeronomic interest*. Washington, NASA, 1975.
- Moreels, G.; Hersé, M. Photographic evidence of waves around the 85 km level. *Planet. Space Sci.*, **25**(2):265-273, 1977.
- Murtagh, D.P.; Witt, G.; Stegman, J.; McDade, I. C.; Llewellyn, E. J.; Harris, F.; Greer, R. G. H. An assessment of proposed $O(^1S)$ and $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ nightglow excitation parameters. *Planet. Space Sci.*, **35**(1):43-54, 1990.
- Noxon, J. F. Effect of internal gravity waves upon night airglow temperatures. *Geophys. Res. Lett.*, **5**(1):25-27, 1978.
- Ohoyama, H.; Kasai, T.; Yoshimura, Y.; Kimura, H.; Kuwata, K. Initial distribution of vibration of the OH radicals produced in the $H + O_3 \rightarrow OH(X^2\Pi) + O_2$ reaction. *Chem. Phys. Lett.*, **118**(1):263-268, 1985.
- Ortega, J; Rheinboldt, W. *Iterative solution of nonlinear equations in several variables*. New York, Academic Press, 1970.

- Pendleton Jr., W.; Espy, P.; Backer, D.; Steed, A.; Fetrow, M.; Henriksen, K. Observations of OH Meinel (7, 4) P(N'' = 13) transitions in the night airglow. *J. Geophys. Res.*, **94**(A2):505-510, 1989.
- Pinto, I. R. C. A. *Nuvens estratosféricas*. São José dos Campos, Julho, 1993. Comunicação pessoal.
- Press, W. H.; Teukolsky, S. A. Numerical recipes: search algorithm for weak periodic signals in unevenly spaced data. *Computers in Physics*, **10**(s.f.):77-86, 1988.
- Rayleigh, Lord IV. Absolute intensity of the aurora line in the night sky and the number of transition. *Proc. Royal Soc. London*, **A129**(s.f.):1930.
- On a night sky of exceptional brightness and on distinction between the polar aurora and night sky. *Proc. Royal Soc. London*, **A121**:376-381, 1931.
- Rees, M. H. *Physics and chemistry of the upper atmosphere*. Cambridge, Cambridge Univ., 1989.
- Rice, J. R. *Numerical methods, software, and analysis*. Singapore, McGraw-Hill, 1983.
- Rodrigo, R.; López-González, M. J.; López-Moreno, J. J. Variability of the neutral mesospheric and lower thermospheric composition in the diurnal cycle. *Planet. Space Sci.*, **39**(6):803-820, 1991.
- Schlapp, R. Intensities in singlet-triplet bands of diatomic molecules. *Phys. Rev.*, **39**(s.f.):806-815, 1932.
- Fine structure in the ground state of the oxygen molecule, and the rotational intensity distribution in the atmospheric oxygen band. *Phys. Rev.*, **51**(s.f.):342-345, 1937.
- Schubert, G.; Walterscheid, R. L. Wave-driven fluctuations in OH nightglow from an extended source region. *J. Geophys. Res.*, **91**(A9): 9903-9915, 1988.
- Schubert, G.; Walterscheid, R. L.; Hecht, J. H. Temperature gradients at mesopause heights inferred from OH nightglow data. *J. Geophys. Res.*, **95**(A11):19061-19067, 1990.
- Schubert, G.; Walterscheid, R. L.; Hickey, M. P. Gravity wave-driven fluctuations in OH nightglow from an extended, dissipative emission region. *J. Geophys. Res.*, **96**(A8):13869-13880, 1991.
- Sivjee, G. G.; Hamwey, R. M. Temperature and chemistry of the polar mesopause OH. *J. Geophys. Res.*, **92**(A4):4663-4667, 1987.

- Sivjee, G. G.; Walterscheid, R. L.; Hecht, J. H.; Hamwey, R. M.; Schubert, G.; Christensen, A. B. Effects of atmospheric disturbances on polar mesopause airglow OH emission. *J. Geophys. Res.*, **92**(A5):7651-7656, 1987.
- Slanger, T. G.; Black, G. O(¹S) production from oxygen atom recombination. *J. Chem. Phys.*, **64**(9):3767-3773, 1975.
- Streit, G. E.; Johnston, H. S. Reactions and quenching of vibrationally excited hydroxyl radicals. *J. Chem. Phys.*, **64**(1):95-103, 1976.
- Swenson, G. R.; Mende, S. B.; Geller, S. P. Fabry-Perot imaging observations of OH(8-3): Rotational temperatures and gravity waves. *J. Geophys. Res.*, **92**(D6):12251-12263, 1990.
- Takahashi, H. *Observações das bandas (9, 4), (8, 3), (7, 2), (6, 2) e (5,1) da emissão OH na luminescência atmosférica e o mecanismo de produção da OH excitada na alta atmosfera.* (Tese de Doutorado em Ciência Espacial) – INPE, 1981.
- Takahashi, H.; Sahai, H.; Batista, P. P. Airglow O₂(¹Σ) atmospheric band at 8645 Å and the rotational temperature observed at 23°S. *Planet. Space Sci.*, **34**(2):301-306, 1986.
- Takahashi, H.; Sahai, Y.; Clemesha, B. R.; Simonich, D. M.; Teixeira, N. R.; Lobo, R. M.; Eras, A. Equatorial mesospheric and F-region airglow emissions observed from latitude 4° south. *Planet. Space Sci.*, **37**(6):649-655, 1989.
- Takahashi, H.; Sahai, Y.; Teixeira, N. R. Airglow intensity and temperature response to atmospheric wave propagation in the mesopause region. *Adv. Space Res.*, **10**(10):77-81, 1990.
- Takahashi, H.; Sahai, Y.; Batista, P. P.; Clemesha, B. R. Atmospheric gravity wave effect on the airglow O₂ (0,1) e OH (9,4) band intensity and temperature variations observed from a low latitude station. *Adv. Space Res.*, **12**(10):131-134, 1992.
- Tarasick, D. W.; Evans, W. F. J. A review of the O₂(a¹Δ) and O₂(b¹Σ_g⁺) airglow emissions. Trabalho apresentado. *Scientific Assembly of COSPAR*, 28°, Haya, 1990.
- Tarasick, D. W.; Shepherd, G. The effects of gravity waves on complex airglow chemistries I: O₂(b¹Σ_g⁺) emission. *J. Geophys. Res.*, **97**(A3):3185-3193, 1992.
- The effects of gravity waves on complex airglow chemistries II: OH emission. *J. Geophys. Res.*, **97**(A3):3195-3208, 1992.

- Taylor, M. J.; Hapgood, M. A.; Rothwell, P. Observations of gravity wave propagation in the OI (557.7 nm), Na (589.2 nm) and the near infrared OH emissions. *Planet. Space Sci.*, **35**(5):413-427, 1987.
- Turnbull, D. N.; Lowe, R. P. New hydroxyl transition probabilities and their importance in airglow studies. *Planet. Space Sci.*, **37**(6):723-738, 1989.
- Vallance, J. *Aurora*. Dordrecht, D. Reidel, 1974.
- Viereck, R. A.; Deehr, C. S. On the interaction between gravity waves and the OH Meinel (6-2) and the O₂ atmospheric (0-1) bands in the polar night airglow. *J. Geophys. Res.*, **94**(A5):5397-5404, 1989.
- Walterscheid, R. L.; Schubert, G.; Straus, J. M. A dynamical-chemical model of wave-driven fluctuations in the OH nightglow. *J. Geophys. Res.*, **92**(A2):1241-1254, 1987.
- Walterscheid, R. L.; Schubert, G. A dynamical-chemical model of tidally driven fluctuations in the OH nightglow. *J. Geophys. Res.*, **92**(A8):8775-8780, 1987.
- Weinstock, J. Theory of the interaction of gravity waves with O₂(¹Σ) airglow. *J. Geophys. Res.*, **83**(A11):5175-5185, 1978.
- Witt, G.; Stegman, J.; Solheim, B. H.; Llewellyn, E. J. A measurement of the O₂(b¹Σ_g⁺ - X³Σ_g⁻) atmospheric band and the OI(¹S) green line in the nightglow. *Planet. Space Sci.*, **27**(1):341-350, 1979.
- Yano, K.; Kiyama, Y. Nightglow photometer calibration (I). A low brightness standard - NAGO. **2**; 1975.
- Yee, J. H.; Niciejewski, R.; Luo, M. Z. Observation of O₂(¹Σ) and OH nightglow during the ALOHA-90 campaign. *Geophys. Res. Lett.*, **18**(7): 1357-1369, 1991.
- Zhang, S. *Gravity waves from O₂ airglow*. (Doctoral Dissertation) - Univ. of York, Ontario, 1991.

APÊNDICE A

PROGRAMAS DE COMPUTADOR

- O primeiro programa (`spect02.bas`) refere-se ao cálculo do espectro rotacional da transição eletrônica O_2 ($b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$) ou sistema atmosférico em função da temperatura.
- O segundo programa (`spect0H.bas`) refere-se ao cálculo do espectro rotacional da transição vibracional $X^2\Pi(v' - v'')$ ou bandas de Meinel em função da temperatura. Os valores usados para os coeficientes de Eintein ($A_{v''j''}^{v'j'}$) são devidos a Turnbull e Lowe (1989) e a Mies (1974).

O fator de correção ao ar atmosférico é obtida de acordo com a seguinte expressão:

$$\lambda_{ar} = \frac{\lambda_{vac}}{\mu(\lambda)} \times 10^{-1}, \quad (\lambda \text{ em nm}) \quad (0.1)$$

onde o índice de refração do ar usado é (extraído do Almanaque de Ciência, Observatório Astronômico da Universidade de Tokyo, 1970)

$$\mu(\lambda) = 1 + \left\{ 6432.8 + \frac{2949810}{(146 - \lambda^{-2})} + \frac{25540}{(41 - \lambda^{-2})} \right\} \times 10^{-8}. \quad (0.2)$$

- O terceiro programa (`analysis.bas`) é destinado a análise espectral dos dados de temperatura e taxa de emissão do MULT12: rotina do método de máxima entropia (MEM) — obtenção do conteúdo espectral ω_k para diversos valores da ordem M do filtro de predição — e a rotina de regressão linear múltipla por funções do tipo $R_k \cos(\omega_k t - \phi_k)$.

```

DECLARE SUB Ordenacao (compr!(), itot!(), ntot!)
DECLARE FUNCTION correcao! (energia!)
DECLARE SUB Termorotsigma1 (v AS INTEGER, F!())
DECLARE SUB Termorotsigma3 (v AS INTEGER, F1!(), F2!(), F3!())
DECLARE FUNCTION Termovibr! (v AS INTEGER, estado$)
'Programa que calcula o espectro do O2 (banda atmosferica)

CLEAR
CLS

DIM zero(63, 30)
DIM F(0 TO 31), F1(0 TO 31), F2(0 TO 31), F3(0 TO 31)
DIM w(0 TO 31), PP(0 TO 31), QP(0 TO 31), QR(0 TO 31), RR(0 TO 31)
DIM lambdaPP(0 TO 30), lambdaQP(0 TO 30), lambdaQR(0 TO 30), lambdaRR(0 TO 30)
DIM vkPP(0 TO 30), vkQP(0 TO 30), vkQR(0 TO 30), vkRR(0 TO 30)
DIM ssPP(0 TO 30), ssQP(0 TO 30), ssQR(0 TO 30), ssRR(0 TO 30)
DIM iPP(0 TO 30), iQP(0 TO 30), iQR(0 TO 30), iRR(0 TO 30)
DIM itot(0 TO 62), compr(0 TO 62), itotaux(63, 30), compraux(63, 0 TO 1)
DIM v1 AS INTEGER, v2 AS INTEGER, K AS INTEGER, j AS INTEGER

CONST planck# = 1.438786      'unidades: K cm
DIM fparticao AS DOUBLE

LOCATE 3, 3
PRINT "*** Molecula excitada O_2 (Sigma_1 -- Sigma_3) **** Calculo do espectro *****": PRINT
PRINT " Os termos vibracionais (energia) - G(v) --"
PRINT "          rotacionais (energia) - F(k,v) "
PRINT "                                     sao dados em unidades cm-1 "

novamente:
PRINT : PRINT "          ***** Entre com a banda vibracional: *****";
PRINT "          (valores de v1, v2 = 0, 1, ..., 9)"
linhaatual = CSRLIN
INPUT " v1 = ", v1: LOCATE linhaatual, 20: INPUT " v2 = ", v2

IF v1 > 10 OR v1 < 0 OR v2 > 10 OR v2 < 0 THEN
  PRINT "Entrar novos valores para v1 e/ou v2 :....."
  PRINT
  GOTO novamente
END IF

'-----Calculo dos termos vibracionais-----

g1 = Termovibr(v1, "sigma1")      'estado eletronic Sigma_1
g2 = Termovibr(v2, "sigma3")      'estado eletronic Sigma_3

'Banda de origem:
ve = 13195.2221#
v0 = ve + (g1 - g2)

'----- Calculo dos termos rotacionais -----

Termorotsigma1 v1, F()              'estado eletronic Sigma_1
Termorotsigma3 v2, F1(), F2(), F3() 'estado eletronic Sigma_3

'Os ramos (espectro rotacional):

FOR K = 0 TO 30 STEP 2
  j = K
  IF K = 0 THEN
    PPO = F(0) - F2(1)
  ELSE
    PP(K) = F(j) - F2(j + 1)      ' J e K :relativos ao estado Sigma_1
    QP(K) = F(j) - F3(j + 1)
    QR(K) = F(j) - F1(j - 1)
    RR(K) = F(j) - F2(j - 1)
  
```

```

      END IF
    NEXT K

'-----Calculo do Espectro (Vibr. + Rot.)-----

'Os valores da energia estao em unidades cm-1

'Valores no vacuo : vk_amo      em cm-1
'Valores no ar    : lambda_amo  em nm (nanometro)

FOR K = 0 TO 30 STEP 2      ' K : indice do estado Sigma_1
  IF K = 0 THEN
    vkOPP = v0 + PPO: lambdaOPP = correcao(vkOPP)
  ELSE
    vkPP(K) = v0 + PP(K): lambdaPP(K) = correcao(vkPP(K))
    vkQP(K) = v0 + QP(K): lambdaQP(K) = correcao(vkQP(K))
    vkQR(K) = v0 + QR(K): lambdaQR(K) = correcao(vkQR(K))
    vkRR(K) = v0 + RR(K): lambdaRR(K) = correcao(vkRR(K))
  END IF
NEXT K

'Imprime o espectro de O_2:
K = 0
CLS
PRINT "----- O espectro de O_2 (Banda Atmosferica)-----"
PRINT "          banda ( "; v1; ", "; v2; " ) "
PRINT " K =      ramo PP      ramo QP      ramo QR      ramo RR"
PRINT "          ( Comprimento de onda no vacuo)"
PRINT USING "###.###"; K; : PRINT ; SPC(6); : PRINT USING "###.###"; 1 / vkOPP * 1E+07
FOR K = 2 TO 30 STEP 2
  PRINT USING "###.###"; K; : PRINT ; SPC(6);
  PRINT USING "###.###"; 1 / vkPP(K) * 1E+07; : PRINT ; SPC(7);
  PRINT USING "###.###"; 1 / vkQP(K) * 1E+07; : PRINT ; SPC(7);
  PRINT USING "###.###"; 1 / vkQR(K) * 1E+07; : PRINT ; SPC(7);
  PRINT USING "###.###"; 1 / vkRR(K) * 1E+07
NEXT K
PRINT "-----"
PRINT
PRINT "pressione qualquer tecla para continuar ..."
DO WHILE INKEY$ = ""
LOOP

CLS
K = 0
PRINT "----- O espectro de O_2 (Banda Atmosferica)-----"
PRINT "          banda ( "; v1; ", "; v2; " ) "
PRINT " K =      ramo PP      ramo QP      ramo QR      ramo RR"
PRINT "          ( Comprimento de onda corrigido ao ar )"
PRINT USING "###.###"; K; : PRINT ; SPC(6); : PRINT USING "###.###"; lambdaOPP
FOR K = 2 TO 30 STEP 2
  PRINT USING "###.###"; K; : PRINT ; SPC(6);
  PRINT USING "###.###"; lambdaPP(K); : PRINT ; SPC(7);
  PRINT USING "###.###"; lambdaQP(K); : PRINT ; SPC(7);
  PRINT USING "###.###"; lambdaQR(K); : PRINT ; SPC(7);
  PRINT USING "###.###"; lambdaRR(K)
NEXT K
PRINT "-----"
PRINT
PRINT "pressione qualquer tecla para continuar ..."
DO WHILE INKEY$ = ""
LOOP

'-----Intensidades na estrutura rotacional-----

nindice = 0
FOR T = 150 TO 250 STEP 5 'Variacao da temperatura na regio do interesse
  ' 150 K -- 250 K
nindice = nindice + 1

```

'Fatores de transicao (funcao peso): (Schlapp, 1932)

```
fparticao = 0

FOR K = 0 TO 30 STEP 2
  IF K = 0 THEN
    ssOPP = 1
    fparticao = ssOPP * EXP(-planck# * F(K) / T)
  ELSE
    ssPP(K) = 1 / 2 * (K + 2)
    ssQP(K) = 1 / 2 * (K + 3 / 4)
    ssQR(K) = 1 / 2 * (K + 1 / 4)
    ssRR(K) = 1 / 2 * (K - 1)
    fparticao = fparticao + ssPP(K) * EXP(-planck# * F(K) / T)
    fparticao = fparticao + ssQP(K) * EXP(-planck# * F(K) / T)
    fparticao = fparticao + ssQR(K) * EXP(-planck# * F(K) / T)
    fparticao = fparticao + ssRR(K) * EXP(-planck# * F(K) / T)
  END IF
NEXT K
```

'Intensidades rotacionais absolutas: (cm-3)

```
FOR K = 0 TO 30 STEP 2
  exponencial = EXP(-planck# * F(K) / T)
  IF K = 0 THEN
    iOPP = vkOPP ^ 3 * ssOPP * exponencial / fparticao
    normal = iOPP
  ELSE
    iPP(K) = vkPP(K) ^ 3 * ssPP(K) * exponencial / fparticao
    iQP(K) = vkQP(K) ^ 3 * ssQP(K) * exponencial / fparticao
    iQR(K) = vkQR(K) ^ 3 * ssQR(K) * exponencial / fparticao
    iRR(K) = vkRR(K) ^ 3 * ssRR(K) * exponencial / fparticao
    normal = normal + iPP(K) + iQP(K) + iQR(K) + iRR(K)
  END IF
NEXT K
```

'Intensidades rotacionais normalizadas (no AR):

```
FOR K = 0 TO 30 STEP 2
  IF K = 0 THEN
    itot(K) = iOPP / normal
    compr(K) = lambdaOPP
    ntot = 1
  ELSE
    m = K / 2
    itot(m) = iPP(K) / normal
    compr(m) = lambdaPP(K): m = m + 15: ntot = ntot + 1
    itot(m) = iQP(K) / normal
    compr(m) = lambdaQP(K): m = m + 15: ntot = ntot + 1
    itot(m) = iQR(K) / normal
    compr(m) = lambdaQR(K): m = m + 15: ntot = ntot + 1
    itot(m) = iRR(K) / normal
    compr(m) = lambdaRR(K): ntot = ntot + 1
  END IF
NEXT K
```

'Impressao das intensidades:

```
IF a$ <> "E" THEN
  K = 0
  CLS
  PRINT "-- Intensidades Normalizadas (%) 0_2 ("; v1; ", "; v2; ") ---";
  PRINT "Temperatura = "; : PRINT USING "###"; T; : PRINT " --"
  PRINT
  PRINT "F.Particao K =      ramo PP      ramo QP      ramo QR      ramo RR"
  PRINT USING "###.##"; fparticao;
  PRINT USING "###"; K; : PRINT ; SPC(6);
  PRINT USING "##.#####"; 100 * iOPP / normal
  FOR K = 2 TO 30 STEP 2
    PRINT ; SPC(7);
    PRINT USING "###"; K; : PRINT ; SPC(6);
    PRINT USING "##.#####"; 100 * iPP(K) / normal; : PRINT ; SPC(5);
    PRINT USING "##.#####"; 100 * iQP(K) / normal; : PRINT ; SPC(5);
```

```

PRINT USING "##.######"; 100 * IQR(K) / normal; : PRINT ; SPC(5);
PRINT USING "##.######"; 100 * INR(K) / normal
NEXT K
PRINT "-----"
PRINT "pressione E para nao mais exibir as intensidades na tela ..."
PRINT " ou S para parar a tela..... ";
a$ = UCASE$(INKEY$)
IF a$ = "S" THEN
PRINT "Pressione qualquer tecla para continuar ..."
DO WHILE INKEY$ = ""
LOOP
END IF
ELSE
CLS
LOCATE 5, 5
PRINT " ... dando continuidade ao calculo das intensidades Relativas para
*(Continua)* T = "; : PRINT ; USING "##"; T

PRINT
PRINT "Caso queira descontinuar o programa pressione S"
b$ = UCASE$(INKEY$)
IF b$ = "S" THEN END
END IF
'Ordenacao das intensidades (em comprimento de onda) : para armazenar em disco

Ordenacao compr(), itot(), ntot

FOR i = 0 TO ntot
IF nindice = 1 THEN
itotaux(i, 0) = compr(i)
END IF
itotaux(i, nindice) = itot(i)
NEXT i

NEXT T

filename$ = "arqinten.dat"
OPEN filename$ FOR OUTPUT ACCESS WRITE AS #1

PRINT
PRINT
PRINT "Armazenado os resultados em DISCO ..."
PRINT "Nome do arquivo : directorio atual\"; : PRINT ; filename$
PRINT "O arquivo contem "; : PRINT ; nindice + 1; : PRINT "-colunas"
PRINT "A primeira coluna e o comprimento de onda no ar"
PRINT " as restantes, sao as intensidades normalizadas em dadas temperaturas"

FOR i = 0 TO ntot - 1

PRINT #1, USING "##.###### "; compr(i);
FOR j = 1 TO nindice
PRINT #1, USING "##.######"; itotaux(i, j)*100;
NEXT j
PRINT #1,

NEXT i

END

;

FUNCTION correcao (energia)

lambda = 1E+08 / energia

'Extraido do Almanaque Jo Ciencia, Tokio, 1970
a1 = 6432.3: a2 = 2949810
a3 = 146: a4 = 25540: a5 = 41

```

```
correcao = lambda * .1 / (1 + (a1 + a2 / (a3 - 1 / (lambda * lambda)) +
*(continua)*          a4 / (a5 - 1 / (lambda * lambda))) * 1E-08)
```

```
END FUNCTION
```

```
SUB Ordenacao (compr(), itot(), ntot)
```

```
'Rotina de ordenacao:
```

```
DIM s AS INTEGER, j AS INTEGER, t1 AS INTEGER
```

```
s = ntot
```

```
ciclo1:
```

```
t1 = 0
```

```
FOR j = 0 TO s - 2
```

```
  IF compr(j) > compr(j + 1) THEN
```

```
    caux = compr(j)
```

```
    iaux = itot(j)
```

```
    compr(j) = compr(j + 1)
```

```
    itot(j) = itot(j + 1)
```

```
    compr(j + 1) = caux
```

```
    itot(j + 1) = iaux
```

```
    t1 = j
```

```
  END IF
```

```
NEXT j
```

```
IF t1 <> 0 THEN
```

```
  s = t1 + 1
```

```
  GOTO ciclo1
```

```
END IF
```

```
END SUB
```

```
SUB Termorotsigma1 (v AS INTEGER, F())
```

```
DIM K AS INTEGER
```

```
DIM Be AS DOUBLE, alfae AS DOUBLE, gammae AS DOUBLE, deltae AS DOUBLE
```

```
DIM De AS DOUBLE, betae AS DOUBLE, Dv AS DOUBLE, Bv AS DOUBLE
```

```
'Constantes da molecula de O2(Sigma_1 - Sigma_3): Paul H. Krupenie, 1972
```

```
' J. Phys. Chem. Ref. Data, V1, B2
```

```
'constantes rotacionais:
```

```
Be = 1.4004796#
```

```
alphae = .018169303#
```

```
gammae = -.00004294192#
```

```
deltae = 0!
```

```
De = 5.356E-06
```

```
betae = 7.7E-08
```

```
He = 0!
```

```
'Calculo da energia F:
```

```
vs = v + .5
```

```
Bv = Be - alfae * vs + gammae * vs * vs + deltae * vs * vs * vs
```

```
Dv = De + betae * vs
```

```
Hv = He
```

```
FOR K = 0 TO 30 STEP 2
```

```
  F(K) = Bv * K * (K + 1) - Dv * K * K * (K + 1) * (K + 1) +
```

```
*(continua)*          Hv * K * K * K * (K + 1) * (K + 1) * (K + 1)
```

```
NEXT K
```

```
END SUB
```

```
SUB Termorotsigma3 (v AS INTEGER, F1(), F2(), F3())
```

```
DIM K AS INTEGER
```

```
DIM Be AS DOUBLE, alfae AS DOUBLE, gammae AS DOUBLE, deltae AS DOUBLE
```

```
DIM De AS DOUBLE, betae AS DOUBLE, gamma AS DOUBLE, l AS DOUBLE
```

```
DIM Bv AS DOUBLE, Dv AS DOUBLE, W0 AS DOUBLE
```

```

'Constantes da molecula de O2(Sigma_1 - Sigma_3): Paul H. Krupenie, 1972
'
      J. Phys. Chem. Ref. Data, V1, #2

'constantes rotacionais:
Be = 1.445622
alphae = .01593268#
gammae = 6.406456E-05
deltae = -2.846158E-06
De = 4.957E-06
betae = 8.8E-08
He = 0
      'Babcock, H. D. and Herzberg, L.

gamma = -.00837      'interacao do spin eletronico nao-compensada com o campo
'                    'magnetico devido a rotacao da molecula

IF v = 0 THEN
  l = 1.984      'interacao spin-spin dos eletrons nao-compensada
ELSE
  l = 1.993
END IF

'Calculo das energias F1, F2, F3: 'Babcock, H. D. and Herzberg, L.
'
      Astrophys. J. 108,(2)167-190, 1948

vs = v + .5
Bv = Be - alphae * vs + gammae * vs * vs + deltae * vs * vs * vs
Dv = De + betae * vs
Hv = He

FOR K = 1 TO 31 STEP 2
  W0 = Bv * K * (K + 1) - Dv * K * K * (K + 1) * (K + 1)
  *(continua)*      + Hv * K * K * K * (K + 1) * (K + 1) * (K + 1)
  F3(K) = W0 - (2 * K - 1) * Bv - l + SQR((2 * K - 1) *
*(continua)*      (2 * K - 1) * Bv * Bv + l * l - 2 * l * Bv) - gamma * K
  F2(K) = W0
  F1(K) = W0 + (2 * K + 3) * Bv - l - SQR((2 * K + 3) *
*(continua)*      (2 * K + 3) * Bv * Bv + l * l - 2 * l * Bv) + gamma * (K + 1)
NEXT K

END SUB

FUNCTION Termovibr (v AS INTEGER, estado$)

DIM we3 AS DOUBLE, we1 AS DOUBLE, wexe3 AS DOUBLE, wexe1 AS DOUBLE
DIM weye3 AS DOUBLE, weye1 AS DOUBLE, weze3 AS DOUBLE, weze1 AS DOUBLE

'Constantes da molecula de O2(Sigma_1 - Sigma_3): Paul H. Krupenie, 1972
'
      J. Phys. Chem. Ref. Data, V. 1, #. 2, pp 423-534

'constantes vibracionais:
we3 = 1580.1932#: we1 = 1432.6661#
wexe3 = 11.980804#: wexe1 = 13.9336
weye3 = .047474736#: weye1 = -.0143
weze3 = -.0012727481#: weze1 = 0

vs = v + .5
SELECT CASE estado$
  CASE IS = "sigma1"
    Termovibr = we1 * vs - wexe1 * vs * vs + weye1 * vs * vs * vs + weze1 * vs * vs * vs * vs
  CASE ELSE
    Termovibr = we3 * vs - wexe3 * vs * vs + weye3 * vs * vs * vs + weze3 * vs * vs * vs * vs
END SELECT

END FUNCTION

```

— FIM DO PRIMEIRO PROGRAMA —

```

DECLARE SUB Mensagem ()
DECLARE SUB Termorot2Pi (v AS INTEGER, F1() AS DOUBLE, F2() AS DOUBLE)
DECLARE SUB Ordenacao (compr!(), itot!(), ntot!)
DECLARE FUNCTION correcao# (energia AS DOUBLE)
DECLARE FUNCTION Termovibr# (v AS INTEGER, author$)
'Programa que calcula o espectro de OH (Hidroxila excitada)

'$DYNAMIC
CLEAR
CLS

DIM zero(90, 30)
DIM autores$(5), filename$(2)
DIM F(2, 20) AS DOUBLE, F1(20) AS DOUBLE
DIM F12(20) AS DOUBLE, F21(20) AS DOUBLE, F22(20) AS DOUBLE
DIM P(2, 20) AS DOUBLE, Q(2, 20) AS DOUBLE, R(2, 20) AS DOUBLE
DIM lambdaP(3, 2, 1 TO 16) AS DOUBLE, lambdaQ(3, 2, 1 TO 16) AS DOUBLE
DIM lambdaR(3, 2, 1 TO 17) AS DOUBLE
DIM v0(3) AS DOUBLE
DIM vKP(3, 2, 1 TO 16) AS DOUBLE, vKQ(3, 2, 1 TO 16) AS DOUBLE
DIM vKR(3, 2, 1 TO 17) AS DOUBLE
DIM AP(4, 2, 2, 1 TO 17) AS DOUBLE, AQ(4, 2, 2, 1 TO 17) AS DOUBLE
DIM AR(4, 2, 2, 1 TO 17) AS DOUBLE
DIM ss(2, 16), normal(2) AS DOUBLE, fparticao AS DOUBLE
DIM iP(2, 2, 0 TO 16) AS DOUBLE, iQ(2, 2, 0 TO 16) AS DOUBLE, iR(2, 2, 0 TO 17) AS DOUBLE

DIM itot(2, 1 TO 90), compr(2, 90), itotaux(2, 90, 0 TO 23)
DIM compr1(90), compr2(90), itot1(90), itot2(90)
DIM v1 AS INTEGER, v2 AS INTEGER, K AS INTEGER, i AS INTEGER, n AS INTEGER
DIM na AS INTEGER, l AS INTEGER, K1 AS INTEGER
DIM g1CR AS DOUBLE, g2CR AS DOUBLE, g1T AS DOUBLE, g2T AS DOUBLE
DIM g1CF AS DOUBLE, g2CF AS DOUBLE

CONST planck# = 1.438786 'unidades: K cm

'Convencoes utilizadas:

'K: autovalor (representa os niveis rotacionais)
'K= 1,... 15

'K1: autovalor auxiliar (definido por conveniencia de impressao dos resultados)
'estado Pi_(1/2) : K1=1,..., 15
'estado Pi_(3/2) : K1=2,...,15

'na : indice utilizado para variar o tipo autor relacionado com G(v)
'na=1 Chamberlain e Roesler
'na=2 Takahashi
'na=3 Coxon e Foster

'n: identificador de autores dos coeficientes de transicao de Einstein
'n=1 : Mies(1974)
'n=2 : Turnbull(1987)

'l: identificador da sub-banda do estado 2Pi
'l=2: 2Pi_(3/2) J= 3/2 ,... K=1 ,... estado superior
'l=1: 2Pi_(1/2) J= 1/2 ,... K=1 ,... "

DATA "Chamberlain e Roesler, 1955","Takahashi, 1980","Coxon e Foster, 1982"
DATA "Mies (1974)","Turnbull (1987)"
FOR na = 1 TO 5
  READ autores$(na)
NEXT na

LOCATE 3, 3
PRINT "*** Molecula excitada OH (2Pi -- 2Pi) *** Calculo do espectro *****": PRINT
PRINT " Os termos vibracionais (energia) - G(v) -"
PRINT " rotacionais (energia) - F(k,v) "
PRINT " sao dados em unidades cm-1 "
PRINT " As intensidades serao calculadas especialmente para"

```

```

PRINT "   as seguintes BANDAS:   (v1= , v2=)"
PRINT "                           (6, 2)"
PRINT "                           (9, 4)"
PRINT "                           (8, 2)"
PRINT "                           (8, 3)"
PRINT
PRINT "**** Caso deseja aumentar o numero de Bandas"
PRINT " modifique a variavel idtot ****"
PRINT
PRINT : PRINT "           ***** Entre com a banda vibracional: *****";
novamente:
PRINT "                           (valores de v1, v2 = 0, 1, ..., 10)"
PRINT "           v1 : estado superior      v2 : estado inferior"
linhaatual = CSRLIN
INPUT "           v1 = ", v1: LOCATE linhaatual, 46: INPUT "v2 = ", v2

IF v1 > 10 OR v1 < 0 OR v2 > 10 OR v2 < 0 THEN
  CLS
  LOCATE 5, 3
  PRINT "Entrar novos valores para v1 e/ou v2 :....."
  PRINT
  GOTO novamente
END IF

'-----Calculo dos termos vibracionais-----

'Dados referentes a G(v) por diversos autores:

data1:
'Chamberlain e Roesler (1955):           (constantes de estiramento)
DATA 3737.90,84.965,0.5398,0.01674,-0.001637

data2:
'Takahashi (1980):           (termos G(v))
DATA 1847.78,5417.40,8321.34,12061.6,15139.3,18054.50,20805.90,23393.90,25806.70,
*(continua)*                               28043.50,30095.10

data3:
'Coxon e Foster (1982):
DATA 1847.726,5417.369,8821.410,12061.771,15139.548,18054.348,20806.549,23392.029,
*(continua)*                               25806.719,28043.783,30093.084

'Chamberlain e Roesler:
g1CR = Termovibr$(v1, "CR")           'Estado eletrónico 2Pi
RESTORE data1
g2CR = Termovibr$(v2, "CR")

'Takahashi:
g1T = Termovibr$(v1, "T")           'Estado eletrónico 2Pi
RESTORE data2
g2T = Termovibr$(v2, "T")

'Coxon e Foster:
g1CF = Termovibr$(v1, "CF")           'Estado eletrónico 2Pi
RESTORE data3
g2CF = Termovibr$(v2, "CF")

'Banda de origem:
ve = 0#
v0(1) = ve + (g1CR - g2CR)           'C. R.
v0(2) = ve + (g1T - g2T)             'T.
v0(3) = ve + (g1CF - g2CF)           'C. F.

'-----Calculo dos termos rotacionais-----

'Dados referentes as constantes rotacionais da molecula de OH:

```

```

data4:
'Coxon e Foster (1982):
DATA 1.9083e-3,1.8695e-3,1.8345e-3,1.8045e-3,1.7809e-3,1.765e-3,1.7654e-3,1.7838e-3,1.7984e-3,
*(continua)*
1.8599e-3,1.9549e-3
DATA -139.054,-139.325,-139.593,-139.85,-140.088,-140.299,-140.439,-140.491,-140.399,
*(continua)*
-140.176,-140.518
'Coxon e Foster (1982):
DATA 18.5504,17.8386,17.1363,16.4409,15.7491,15.0567,14.3588,13.6492,12.9169,12.1517,11.3372

Termorot2Pi v1, F11(), F21() 'estado eletrónico 2Pi superior
RESTORE data4:
Termorot2Pi v2, F12(), F22() ' " " " inferior

FOR K = 1 TO 15 'Por questao de conveniencia
F(1, K) = F11(K)
F(2, K) = F21(K)
NEXT K

'Os ramos (espectro rotacional):

FOR K = 1 TO 18
P(1, K) = F11(K) - F12(K + 1) ' K :relativo ao estado 2Pi superior
P(2, K) = F21(K) - F22(K + 1)
Q(1, K) = F11(K) - F12(K)
Q(2, K) = F21(K) - F22(K)
IF K = 1 THEN
R(1, K) = 0 'Nao existem
R(2, K) = 0
ELSE
R(1, K) = F11(K) - F12(K - 1)
R(2, K) = F21(K) - F22(K - 1)
END IF
NEXT K

'-----Calculo do Espectro (Vibr. + Rot.)-----

'Os valores da energia estao em unidades cm-1

'Valores no vacuo : vk_amo em cm-1
'Valores no ar : lambda_amo em nm (nanometro)

' K : indice do estado 2Pi superior
FOR na = 1 TO 3
FOR K = 1 TO 15
vkP(na, 2, K) = v0(na) + P(2, K): lambdaP(na, 2, K) = correcao#(vkP(na, 2, K))
vkQ(na, 2, K) = v0(na) + Q(2, K): lambdaQ(na, 2, K) = correcao#(vkQ(na, 2, K))
vkR(na, 2, K + 1) = v0(na) + R(2, K + 1): lambdaR(na, 2, K + 1) = correcao#(vkR(na, 2, K + 1))

K1 = K + 1
vkP(na, 1, K1) = v0(na) + P(1, K): lambdaP(na, 1, K1) = correcao#(vkP(na, 1, K1))
vkQ(na, 1, K1) = v0(na) + Q(1, K): lambdaQ(na, 1, K1) = correcao#(vkQ(na, 1, K1))
vkR(na, 1, K1 + 1) = v0(na) + R(1, K + 1): lambdaR(na, 1, K1 + 1) = correcao#(vkR(na, 1, K1 + 1))
NEXT K
NEXT na

'Imprime o espectro do OH:

FOR na = 1 TO 3
K = 0
CLS
PRINT "----- 0 espectro do OH (2Pi - 2Pi)-----"
PRINT " banda ( "; v1; ", "; v2; " ) "
PRINT "-----Transicoes Intramultipletos-----"
PRINT "( Comprimento de onda no VACUO nm -- valores G(v): "; autores$(na); " )"
PRINT " J = ramo P2 ramo Q2 ramo R2 ramo P1 ramo Q1 ramo R1 "

FOR K = 1 TO 15
J = K - 1 / 2
PRINT USING "##.##"; J; : PRINT ; SPC(3);

```

```

      IF K = 1 THEN      'J=1/2
PRINT USING "###.###"; 1 / vkP(na, 2, K) * 1E+07; : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; 1 / vkQ(na, 2, K) * 1E+07
      ELSE
PRINT USING "###.###"; 1 / vkP(na, 2, K) * 1E+07; : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; 1 / vkQ(na, 2, K) * 1E+07; : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; 1 / vkR(na, 2, K) * 1E+07; : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; 1 / vkP(na, 1, K) * 1E+07; : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; 1 / vkQ(na, 1, K) * 1E+07; : PRINT ; SPC(4);
IF K = 2 THEN      'J=3/2
      PRINT " "
      ELSE
      PRINT USING "###.###"; 1 / vkR(na, 1, K) * 1E+07
END IF
      END IF
      NEXT K

PRINT "-----"
PRINT
PRINT "pressione PRISC ou outra qualquer tecla para continuar ..."
DO WHILE INKEY$ = ""
LOOP

K = 0
CLS
PRINT "----- 0 espectro de 0H (2Pi - 2Pi)-----"
PRINT "          banda ( " ; v1 ; " ; " ; v2 ; " ) "
PRINT "-----Transicoes Intramultipletos-----"
PRINT "( Comprimento de onda no AR nm -- valores G(v): " ; autores$(na) ; " )"
PRINT "J =   ramo P2   ramo Q2   ramo R2   ramo P1   ramo Q1   ramo R1"

FOR K = 1 TO 15
      J = K - 1 / 2
      PRINT USING "##.##"; J; : PRINT ; SPC(3);
      IF K = 1 THEN
PRINT USING "###.###"; lambdaP(na, 2, K); : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; lambdaQ(na, 2, K)
      ELSE
PRINT USING "###.###"; lambdaP(na, 2, K); : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; lambdaQ(na, 2, K); : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; lambdaR(na, 2, K); : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; lambdaP(na, 1, K); : PRINT ; SPC(4);
PRINT USING "###.###"; lambdaQ(na, 1, K); : PRINT ; SPC(4);
IF K = 2 THEN
      PRINT " "
      ELSE
      PRINT USING "###.###"; lambdaR(na, 1, K)
END IF
      END IF
      NEXT K

PRINT "-----"
PRINT
PRINT "pressione PRISC ou outra qualquer tecla para continuar ..."
DO WHILE INKEY$ = ""
LOOP
NEXT na

'-----Intensidades na estrutura rotacional-----

'Convencoes utilizadas:

'n: identificador de autores dos coeficientes de transicao de Einstein
'n=1 : Mies(1974)
'n=2 : Turnbull(1987)

CLS
LOCATE 3, 3
PRINT "Escolha o conjunto de lambda adequado para calcular as intensidades:"

```

```

PRINT "      Opcao:"
PRINT "      1....."; autores$(1)
PRINT "      2....."; autores$(2)
PRINT "      3....."; autores$(3)
PRINT " qualquer outra tecla... encerra o programa"
PRINT "                               Entre com a opcao : "; : INPUT " ", opcao$

DIM opt AS INTEGER

SELECT CASE VAL(opcao$)
  CASE 1 TO 3
    opt = VAL(opcao$)
  CASE ELSE
    END
END SELECT

deltav = v1 - v2
SELECT CASE deltav

  CASE IS = 4

    IF v1 = 6 AND v2 = 2 THEN
id = 1
    ELSE
Mensagem
    END IF

  CASE IS = 5

    IF v1 = 9 AND v2 = 4 THEN
id = 2
    ELSEIF v1 = 8 AND v2 = 3 THEN
id = 4
    ELSE
Mensagem
    END IF

  CASE IS = 6

    IF v1 = 8 AND v2 = 2 THEN
id = 3
    ELSE
Mensagem
    END IF

  CASE ELSE
Mensagem

END SELECT

'Valores das probabilidades de transicao:

idtot = 4      ' idtot = id1 + id2 + id3 + id4 + .....
' onde id identifica cada banda do GH

-----

'id = 1  Identificador da Banda (6,2)

'Mies, 1974: (6,2)
DATA .000,.000,.000,.841,.414,.000
DATA .529,.722,.000,.779,.091,.337
DATA .644,.296,.313,.762,.044,.450
DATA .690,.157,.407,.760,.028,.467
DATA .717,.095,.441,.764,.020,.468
DATA .736,.063,.451,.770,.016,.462
DATA .751,.044,.450,.778,.013,.451
DATA .763,.033,.443,.785,.010,.438
DATA .775,.025,.432,.793,.009,.424
DATA .786,.020,.420,.801,.008,.409
DATA .794,.016,.406,.807,.007,.393

```



```
DATA , , , ,
```

```
'Turnbull, 1987:
```

```
DATA .000,.000,.000,.152,.078,.000
DATA .094,.136,.000,.137,.017,.076
DATA .112,.056,.062,.131,.008,.090
DATA .118,.030,.082,.128,.005,.096
DATA .120,.018,.091,.126,.004,.099
DATA .120,.012,.096,.124,.003,.100
DATA .120,.008,.098,.123,.002,.100
DATA .120,.006,.098,.121,.002,.100
DATA .120,.005,.098,.120,.002,.099
DATA .119,.004,.097,.119,.001,.097
DATA .118,.003,.096,.118,.001,.096
DATA .118,.002,.094,.117,.001,.094
DATA .117,.002,.092,.116,.001,.091
DATA .116,.002,.090,.114,.001,.089
DATA .115,.002,.087,.113,.001,.086
```

```
' id = 4   identificador da banda (8,3)
```

```
'Mies, 1974:   (Nao tem Valores)
```

```
DATA , , , ,
```

```
' Turnbull, 1987:
```

```
DATA 0.000,0.000,0.000,1.338,0.679,0.000
DATA 0.825,1.188,0.000,1.209,0.147,0.658
DATA 0.984,0.488,0.540,1.156,0.070,0.784
DATA 1.034,0.259,0.715,1.127,0.044,0.832
DATA 1.053,0.157,0.790,1.108,0.031,0.851
DATA 1.060,0.103,0.824,1.093,0.024,0.858
DATA 1.060,0.073,0.838,1.080,0.019,0.855
DATA 1.057,0.053,0.840,1.068,0.016,0.848
DATA 1.052,0.040,0.835,1.057,0.013,0.835
DATA 1.045,0.032,0.824,1.045,0.011,0.820
DATA 1.037,0.025,0.809,1.033,0.010,0.801
DATA 1.028,0.021,0.790,1.022,0.009,0.780
DATA 1.018,0.017,0.769,1.009,0.007,0.756
DATA 1.009,0.014,0.745,0.997,0.007,0.731
DATA 0.997,0.012,0.719,0.985,0.006,0.704
```

```
DATA "OK"
```

```
FOR ibanda = 1 TO idtot
```

```
  FOR n = 1 TO 2
```

```
    FOR Kk = 1 TO 15
```

```
      FOR l = 1 TO 2
```

```
        'n=1 : Mies
```

```
        'n=2 : Turnbull
```

```

      READ AP(ibanda, n, l, Kk)
      READ AQ(ibanda, n, l, Kk)
      READ AR(ibanda, n, l, Kk)
    NEXT l
      NEXT Kk
    NEXT n
  NEXT ibanda

  READ ok$
  PRINT ok$
  -----

  'Variacao da temperatura:

  tindice = 0
  FOR T = 150 TO 250 STEP 5 'Variacao da temperatura na regio de interesse
    ' 150 K -- 250 K
  tindice = tindice + 1

  'Funcao Peso:
  FOR K = 1 TO 15
    J1 = 3 / 2 + K - 1
    J2 = 1 / 2 + K - 1
    ss(1, K) = 2 * (2 * J1 + 1)
    ss(2, K) = 2 * (2 * J2 + 1)
  NEXT K

  'Calculo da Funcao Particao:

  fparticao = 0#
  FOR n = 1 TO 2
    normal(1) = 0#
    normal(2) = 0#
  NEXT n

  FOR l = 1 TO 2
    FOR K = 1 TO 15
  fparticao = fparticao + ss(1, K) * EXP(-planck# * F(1, K) / T)
    NEXT K
  NEXT l

  'Intensidades rotacionais absolutas: (cm-3)

  FOR n = 1 TO 2
    FOR K = 1 TO 15
  iP(n, 2, K) = AP(id, n, 2, K) * ss(2, K) * EXP(-planck# * F(2, K) / T) / fparticao
  iQ(n, 2, K) = AQ(id, n, 2, K) * ss(2, K) * EXP(-planck# * F(2, K) / T) / fparticao
  iR(n, 2, K + 1) = AR(id, n, 2, K + 1) * ss(2, K + 1) * EXP(-planck# * F(2, K + 1) / T) / fparticao

  K1 = K + 1
  iP(n, 1, K1) = AP(id, n, 1, K1) * ss(1, K) * EXP(-planck# * F(1, K) / T) / fparticao
  iQ(n, 1, K1) = AQ(id, n, 1, K1) * ss(1, K) * EXP(-planck# * F(1, K) / T) / fparticao
  iR(n, 1, K1 + 1) = AR(id, n, 1, K1 + 1) * ss(1, K + 1) * EXP(-planck# * F(1, K + 1) / T) / fparticao

  normal(n) = normal(n) + iP(n, 2, K) + iQ(n, 2, K) + iR(n, 2, K + 1)
  normal(n) = normal(n) + iP(n, 1, K + 1) + iQ(n, 1, K + 1) + iR(n, 1, K + 2)
    NEXT K
  NEXT n

  'Intensidades rotacionais normalizadas (no AR):

  FOR n = 1 TO 2

    IF normal(n) = 0 THEN normal(n) = 1

    FOR K = 1 TO 15

  H = K
  IF K = 1 THEN
    itot(n, H) = iP(n, 2, K) / normal(n)
    compr(n, H) = lambdaP(opt, 2, K)

```

```

M = M + 15
itot(n, M) = iQ(n, 2, K) / normal(n)
compr(n, M) = lambdaQ(opt, 2, K)
M = M + 14
ELSE
itot(n, M) = iP(n, 2, K) / normal(n)
compr(n, M) = lambdaP(opt, 2, K)
M = M + 15
itot(n, M) = iQ(n, 2, K) / normal(n)
compr(n, M) = lambdaQ(opt, 2, K)
M = M + 14
itot(n, M) = iR(n, 2, K) / normal(n)
compr(n, M) = lambdaR(opt, 2, K)
M = M + 14
itot(n, M) = iP(n, 1, K) / normal(n)
compr(n, M) = lambdaP(opt, 1, K)
M = M + 14
itot(n, M) = iQ(n, 1, K) / normal(n)
compr(n, M) = lambdaQ(opt, 1, K)
M = M + 13
IF K = 2 THEN

ELSE
itot(n, M) = iR(n, 1, K) / normal(n)
compr(n, M) = lambdaR(opt, 1, K)
EED IF
EED IF

NEXT K

ntot = M

NEXT n

'Impressao das intensidades:

FOR n = 1 TO 2

IF A$ <> "E" THEN
K = 0

CLS
PRINT "-- Intensidades Normalizadas (%) OR ("; v1; ", "; v2; ") ___Temperatura = ";
PRINT USING "###"; T; : PRINT " ---"
PRINT "   Valores de Probabilidades de Transicao devidos a "; autores$(n + 3)
PRINT
PRINT "J =   ramo P2   ramo Q2   ramo R2   ramo P1   ramoQ1   ramoR1"
FOR K = 1 TO 15
J = K - 1 / 2
PRINT USING "##.##"; J; : PRINT ; SPC(3);
IF K = 1 THEN
PRINT USING "##.#####"; 100 * iP(n, 2, K) / normal(n); : PRINT ; SPC(3);
PRINT USING "##.#####"; 100 * iQ(n, 2, K) / normal(n)
ELSE
PRINT USING "##.#####"; 100 * iP(n, 2, K) / normal(n); : PRINT ; SPC(3);
PRINT USING "##.#####"; 100 * iQ(n, 2, K) / normal(n); : PRINT ; SPC(3);
PRINT USING "##.#####"; 100 * iR(n, 2, K) / normal(n); : PRINT ; SPC(3);
PRINT USING "##.#####"; 100 * iP(n, 1, K) / normal(n); : PRINT ; SPC(3);
PRINT USING "##.#####"; 100 * iQ(n, 1, K) / normal(n); : PRINT ; SPC(3);
IF K = 2 THEN
PRINT " "
ELSE

PRINT USING "##.#####"; 100 * iR(n, 1, K) / normal(n)
EED IF
EED IF
NEXT K

PRINT "-----"
PRINT "pressione E   para nao mais exibir as intensidades na tela ..."
PRINT " ou         S   para parar a tela..... ";

```

```

AS = UCASE$(INKEY$)
IF AS = "S" THEN
  PRINT "Pressione PRtSC ou outra qualquer tecla para continuar ..."
  DO WHILE INKEY$ = ""
  LOOP
END IF
ELSE
CLS
LOCATE 5, 5
PRINT "...dando continuidade ao calculo das intensidades para T = "; : PRINT ; USING "###"; T
PRINT
PRINT "Caso queira descontinuar o programa pressione S"
B$ = UCASE$(INKEY$)
IF B$ = "S" THEN END
  END IF

NEXT n

'Ordenacao das intensidades (em comprimento de onda) : para armazenar em disco

FOR n = 1 TO 2
  FOR M = 1 TO ntot
    itot1(M) = itot(1, M)
    compr1(M) = compr(1, M)
    itot2(M) = itot(2, M)
    compr2(M) = compr(2, M)
  NEXT M
NEXT n

Ordenacao compr1(), itot1(), ntot
Ordenacao compr2(), itot2(), ntot

FOR i = 1 TO ntot

IF tindice = 1 THEN
  itotaux(1, i, 0) = compr1(i)
  itotaux(2, i, 0) = compr2(i)
END IF
itotaux(1, i, tindice) = itot1(i) 'Mies
itotaux(2, i, tindice) = itot2(i) 'Turnbull

NEXT i

NEXT T

filename$(1) = "arqlint.dat"
filename$(2) = "arq2int.dat"

FOR n = 1 TO 2
  OPEM filename$(n) FOR OUTPUT ACCESS WRITE AS #n

  PRINT
  PRINT
  PRINT "Armazenado os resultados em DISCO ..."; autores$(n + 3)
  PRINT "Nome do arquivo : directorio atual\"; : PRINT ; filename$(n)
  PRINT "O arquivo contem "; : PRINT ; tindice + 1; : PRINT "-colunas"
  PRINT "A primeira coluna e o comprimento de onda no ar"
  PRINT " as restantes, sao as intensidades normalizadas em dadas temperaturas"

  FOR i = 1 TO ntot

    PRINT #n, USING "###.### " ; itotaux(n, i, 0);
    FOR naux = 1 TO tindice
  PRINT #n, USING "###.###^#### " ; itotaux(n, i, naux)*100;
    NEXT naux
    PRINT #n,

  NEXT i

NEXT n

```

```

CLOSE #n
NEXT n

END

FUNCTION correcao# (energia AS DOUBLE)

DIM lambda AS DOUBLE

lambda = 1E+08 / energia

'Extraido do Almanaque de Ciencia, Tokio, 1970
a1 = 6432.8#: a2 = 2949810#
a3 = 146: a4 = 25540: a5 = 41

correcao# = lambda * .1 / (1 + (a1 + a2 / (a3 - 1 / (lambda * lambda)) +
*(continua)*          a4 / (a5 - 1 / (lambda * lambda))) * 1E-08)

END FUNCTION

SUB Mensagem

CLS
LOCATE 5, 5
SHARED v1 AS INTEGER, v2 AS INTEGER

PRINT " As intensidades para a banda : ( "; v1; " - "; v2; " ) "
PRINT "      nao encontram-se ainda implementadas !!!!!"

END

END SUB

SUB Ordenacao (compr(), itot(), ntot)

'Rotina de ordenacao:

DIM s AS INTEGER, J AS INTEGER, t1 AS INTEGER

s = ntot
ciclo1:
t1 = 1

FOR J = 1 TO s - 1
  IF compr(J) > compr(J + 1) THEN
    caux = compr(J)
    iaux = itot(J)
    compr(J) = compr(J + 1)
    itot(J) = itot(J + 1)
    compr(J + 1) = caux
    itot(J + 1) = iaux
    t1 = J
  END IF
NEXT J
IF t1 <> 1 THEN
  s = t1 + 1
  GOTO ciclo1
END IF

END SUB

SUB Termorot2Pi (v AS INTEGER, F1() AS DOUBLE, F2() AS DOUBLE)

DIM K AS INTEGER, D(0 TO 10), A(0 TO 10), B(0 TO 10), Y(0 TO 10)

FOR i = 0 TO 10
  READ D(i)      'Constante de estiramento (efeito da forca centrifuga)
NEXT i

FOR i = 0 TO 10

```

```

      READ A(i)      'Constante de acoplamento (spin e momento angular)
    NEXT i

    FOR i = 0 TO 10
      READ B(i)      'Constante rotacional
      Y(i) = A(i) / B(i)
    NEXT i

'Calculo da energia F1:  K=J-1/2

    FOR K = 1 TO 19
      F1(K) = B(v) * ((K + 1) * (K + 1) - 1 - .5 * SQR(4 * (K + 1) * (K + 1) +
*(continua)*      Y(v) * (Y(v) - 4))) - D(v) * K * K * (K + 1) * (K + 1)
    NEXT K

'Calculo da energia F2:  K=J+1/2

    FOR K = 1 TO 19
      F2(K) = B(v) * (K * K - 1 + .5 * SQR(4 * K * K + Y(v) * (Y(v) - 4))) -
*(continua)*      D(v) * K * K * (K + 1) * (K + 1)
    NEXT K

    END SUB

    FUNCTION Termovibr# (v AS INTEGER, author$)

    DIM con(0 TO 10)

    'Tres autores diferentes:

    SELECT CASE author$

      CASE IS = "CR"
        FOR i = 1 TO 5
          READ con(i)
        NEXT i
        vs = v + .5
        Termovibr# = con(1) * vs - con(2) * vs * vs + con(3) * vs * vs * vs -
*(continua)*      con(4) * vs * vs * vs * vs + con(5) * vs ^ 5

      CASE IS = "T"
        FOR i = 0 TO 10
          READ con(i)
        NEXT i
        Termovibr# = con(v)

      CASE IS = "CF"
        FOR i = 0 TO 10
          READ con(i)
        NEXT i
        Termovibr# = con(v)

      CASE ELSE
    END SELECT

    END FUNCTION

```

-- --- FIM DO SEGUNDO PROGRAMA --- --


```

PRINT "
separ$ = UCASE$(INPUT$(1))
IF separ$ = "Y" THEN
  separa = 2
ELSE
  separa = 1
END IF
ELSE
  separa = 1
END IF

DiretorioIn filename$, Marq

' Loop sobre cada serie temporal lida:

itot = 0
DO
  itot = itot + 1
  CLS
  LOCATE 1, 1
  PRINT " ##### Calculando para o arquivo: "; filename$(itot); "#####"
  PRINT

  OPEN filename$(itot) FOR INPUT ACCESS READ AS #1

  REDIM s1(250), s2(250), s3(250), s4(250), s5(250)
  i = 0: N = 0
  DO WHILE NOT EOF(1)
    i = i + 1
    IF i <= 7 THEN
      INPUT #1, cabecalho$(i)
      PRINT cabecalho$(i - 1)
    ELSE
      N = N + 1
      INPUT #1, s1(N), s2(N), s3(N), s4(N), s5(N)
      END IF
      LOOP
      CLOSE #1

      REDIM timeh(N), timemin(N), Y(N), Ysep(N, 2), timeminsep(N, 2), timehsep(N, 2)

' Passo da serie temporal:

  passot = (s2(N) - s2(1)) / (N - 1)

' Matriz da serie temporal:

  IF INT(N / 2) - N / 2 < 0 THEN
    ' Numero N impar:
    par = 1
    Nf = INT(N / 2) + 1
    Nfsep(par, 1) = Nf
    Nfsep(par, 2) = Nf - 1
  ELSE
    ' Numero N par:
    par = 2
    Nf = N / 2
    Nfsep(par, 1) = Nf
    Nfsep(par, 2) = Nf
  END IF

  FOR i = 1 TO N
    SWAP s1(i), timeh(i)
    SWAP s2(i), timemin(i)

    SELECT CASE opcao$
    CASE IS = "A"
      SWAP s5(i), Y(i)

    IF separ$ = "Y" THEN
      IF i <= Nf THEN
        Ysep(i, 1) = Y(i)

```

```

    timeminsep(i, 1) = timemin(i)
    timehsep(i, 1) = timeh(i)
ELSE
    j = i - Nf
    Ysep(j, 2) = Y(i)
    timeminsep(j, 2) = passot * (j - 1)
    timehsep(j, 2) = timeh(i)
END IF
END IF

CASE IS = "B"
    SWAP s4(i), Y(i)
CASE ELSE
    SWAP s3(i), Y(i)
END SELECT
NEXT i
ERASE s1, s2, s3, s4, sst

' ***** DEFINICOES: *****

' IMPORTANTE:
' Nao mude o nome das seguintes variaveis:

' Y ():          array do sinal a ser analisado
' N:             comprimento do array Y () -total
' passot:       passo do tempo (constante)
' Mfpe ():      array dos M-ordens coeficientes de autoregressao
' NumMfpe:      Numeros de Mfpe
' MfpeMen ():   array de mensagem de Mfpe()
' startlog:     log- periodo Nyquist
' finallog:     log- valores de N
' deltalog:     log- espacamento dos periodos
' Numlog:       quantidade de log-periodos
' power ():     array espectro de potencia
' fpe ():       criterio Akaike
' decisao$:     Os coeficientes de reflexao de Burg podem ser
'               calculados usando uma Janela de Hamming ?
'               Y (sim) ou N (Nao) : vide decisao$
' NP:           Numeros de pontos extrapolados na reconstrucao da serie
' *****

SELECT CASE opcao$
CASE IS = "B"
    NumMfpe = 2
    alpha0 = 4!
    decisao$ = "N"
CASE ELSE
    NumMfpe = 4
    alpha0 = 2!
    decisao$ = "Y"
END SELECT

REDIN Mfpe(NumMfpe), MfpeMen(NumMfpe) AS STRING * 4

' N-ordem dos coeficientes de auto-regressao a serem impressos:
IF separa = 1 THEN Nf = N

FOR i = 1 TO NumMfpe
    Mfpe(i) = CINT(Nf * ((alpha0 + i) / 10!))
    MfpeMen(i) = STR$(CINT(Mfpe(i) / Nf * 100)) + "%"
NEXT i

' Definicoes quanto ao logaritmico-range:

startlog = FNlog10(2)
IF opcao$ = "A" THEN
    finallog = FNlog10(N)
    deltalog = .005
ELSE
    finallog = FNlog10(N * 5)
    deltalog = .01

```

```

END IF
  Numlog = FIX((finallog - startlog) / deltalog + 1.5)
' Outras definicoes:

  NP = 0

  REDIM power(NumMfpe, Numlog), fpe(Mfpe(NumMfpe))
  REDIM NperNyquist(1 TO NumMfpe), PerNyquist(60, 1 TO NumMfpe)
'***** FIM DAS DEFINICOGES *****

' Analise Espectral:

  FOR sep = 1 TO separa

    IF separa = 2 THEN
      Nfinal = 0
      FOR ii = 1 TO Nfsep(par, sep)
        Nfinal = Nfinal + 1
        Y(ii) = Ysep(ii, sep)
        timemin(ii) = timeminsep(ii, sep)
        timeh(ii) = timehsep(ii, sep)
      NEXT ii
      N = Nfinal
      PRINT "Numero de pontos: "; N
    END IF

    PRINT
    PRINT "***** Analise Espectral *****"
    PRINT

    Burg Mfpe(), Y(), power(), fpe()

    filenamein$ = filename$(itot)

    directorioOut1 filenamein$, opcao$, filenameout$()

    Mensagens cabecalho$()

    Maximos power()

' Reconstrucao das series temporais:

    filenamein$ = filenameout$(sep)

    LeituraPeriodos filenamein$, opcao$, NperNyquist(), PerNyquist()

    filenamein$ = filename$(itot)

    DirectorioOut2 filenamein$, opcao$

    LOCATE 9, 1

    FOR i = 1 TO 15
      PRINT "
    NEXT i

    LOCATE 9, 1

    PRINT
    PRINT "***** Recontrucao da Serie:*****"

    ImprimePredicao timeh(), Y(), NperNyquist(), PerNyquist(), opcao$, cabecalho$()

  NEXT sep

LOOP UNTIL itot = Marq

```

```

END

SUB Akaike (N AS INTEGER, p() AS DOUBLE, fpe())
'Critério FPE (final prediction error) de Akaike
'For a prediction error filter of order m, FPE is:

SHARED M AS INTEGER

'y1 = ((N + 2 * m) / (N - 2 * m)) * p(m)
y2 = ((N + M) / (N - M)) * p(M)

fpe(N) = y2

END SUB

FUNCTION atan2# (angle1 AS DOUBLE, angle2 AS DOUBLE)
' Funcao que calcula o valor principal da funcao arctangente:
' no intervalo de -pi < angle < pi

SHARED pi#

IF angle2 > 0 THEN
  atan2# = ATN(angle1 / angle2)
ELSEIF angle2 < 0 THEN
  atan2# = pi# * SGH(angle1) + ATN(angle1 / angle2)
ELSEIF angle1 = 0 THEN
  atan2# = pi# * SGH(angle2)
ELSE
'arbitrario:
  atan2# = 999999999#
END IF

END FUNCTION

SUB Burg (Mfpe(), Y(), power(), fpe())

' Subrotina simples e rapida para estimativa espectral NEM
' para uma serie temporal Y() igualmente espacada

' A Subrotina e uma formalizacao do metodo
' delineado por Burg (1968)

SHARED N AS INTEGER, NumMfpe AS INTEGER, deltau, startlog, Numlog, deltalog

'-----
' M-ordem do coeficiente autoregressivo maximo:
MaxMfpe = Mfpe(NumMfpe)
'-----

DIM b1(N) AS DOUBLE, b2(N) AS DOUBLE, p(0 TO MaxMfpe) AS DOUBLE
DIM a(N) AS DOUBLE, aa(N) AS DOUBLE
DIM M AS INTEGER, i AS INTEGER

'
'*****

' Inicializacao para o algoritmo de Burg:
Inicializacao Y(), p(), b1(), b2()

' Inicializa a ordem do filtro (FPE)

```

```

M = 1
' Inicializa o criterio de Akaike
Akaike M, p(), fpe()
Potencia M, b1(), b2(), p(), a()
DO
  M = M + 1
  Recursivb M, aa(), a(), b1(), b2()
  Potencia M, b1(), b2(), p(), a()
  Recursiva M, a(), aa()
  Akaike M, p(), fpe()

  FOR i = 1 TO NumMfpe

    SELECT CASE M

CASE IS = Mfpe(i)
  PRINT "Calculando o espectro para M = "; CINT(M / M * 100); "% do comprimento da serie"

  Espectral i, M, a(), p(), power()

  PRINT "    OK !!!!!"

CASE ELSE

  END SELECT

  NEXT i

LOOP WHILE M < MaxMfpe
,
*****
END SUB

SUB DiretorioIn (filename$, Narq AS INTEGER)
DIM namefile$(8)

CLS
LOCATE 4, 1
PRINT "Escolha o diretorio em que seus arquivos .INP estejam localizados:"
PRINT
PRINT " (1) --- c:\delano\inp"
PRINT " (2) --- c:\lang\qbasic\data\"
PRINT " qualquer tecla --- algum outro diretorio"
PRINT
PRINT " Escolha sua opcao (1, 2, .. ) : "; : inicio1$ = UCASE$(INPUT$(1))

SELECT CASE inicio1$
CASE IS = "1"
  dire$ = "c:\delano\inp"
CASE IS = "2"
  dire$ = "c:\lang\qbasic\data"
CASE ELSE
  PRINT
  PRINT "Entre com o diretorio : ( ex.: d:\tmp\data )"; : INPUT " ", dire$
END SELECT

diree$ = "DIR " + dire$ + " > DIRFILE"
PRINT diree$
SHELL diree$

FILES dire$ + "\" + "*.INP"
PRINT
PRINT

OPEN "DIRFILE" FOR INPUT ACCESS READ AS #1
PRINT
PRINT " Escolha a DATA das emissoes (Ex.: 900125 ) : "; : INPUT " ", file$

```

```

filen$ = UCASE$(filen$)
PRINT

Harq = 0
DO
  LINE INPUT #1, dirline$
  IF MID$(dirline$, 3, 10) = filen$ + " IUP" THEN
    Harq = Harq + 1
    namefile$(Harq) = LEFT$(dirline$, 8)
    filename$(Harq) = dire$ + "\" + namefile$(Harq) + ".IUP"
  END IF
LOOP UNTIL EOF(1)
CLOSE #1
KILL "dirfile"

END SUB

SUB diretorioOut1 (nomearq$, opcional$, filenameout$())
  SHARED sep, separa
  DIM filenameout1$(2)

  SELECT CASE opcional$
    CASE IS = "B"
      filenameout$(sep) = LEFT$(RIGHT$(nomearq$, 12), 8) + ".spt"
    CASE IS = "C"
      filenameout$(sep) = LEFT$(RIGHT$(nomearq$, 12), 8) + ".spc"
    CASE ELSE
      IF separa = 1 THEN
        filenameout$(sep) = LEFT$(RIGHT$(nomearq$, 12), 8) + ".wpc"
        filenameout1$(sep) = LEFT$(RIGHT$(nomearq$, 12), 8) + ".dat"
        OPEN filenameout1$(sep) FOR OUTPUT ACCESS WRITE AS #6
      ELSE
        sepp$ = RIGHT$(STR$(INT(sep)), 1)
        filenameout$(sep) = LEFT$(RIGHT$(nomearq$, 12), 8) + ".w" + sepp$ + "c"
        filenameout1$(sep) = LEFT$(RIGHT$(nomearq$, 12), 8) + ".d" + sepp$ + "t"
        OPEN filenameout1$(sep) FOR OUTPUT ACCESS WRITE AS #6
      END IF
    END SELECT

  OPEN filenameout$(sep) FOR OUTPUT ACCESS WRITE AS #2

END SUB

REM $STATIC
SUB DiretorioOut2 (arq$, opcional$)

  SHARED sep, separa
  DIM filenameout$(2)

  SELECT CASE opcional$
    CASE IS = "B"
      filenameout$(sep) = LEFT$(RIGHT$(arq$, 12), 8) + ".aut"
    CASE IS = "C"
      filenameout$(sep) = LEFT$(RIGHT$(arq$, 12), 8) + ".aux"
    CASE ELSE
      IF separa = 1 THEN
        filenameout$(sep) = LEFT$(RIGHT$(arq$, 12), 8) + ".auw"
      ELSE
        sepp$ = RIGHT$(STR$(INT(sep)), 1)
        filenameout$(sep) = LEFT$(RIGHT$(arq$, 12), 8) + ".a" + sepp$ + "w"
      END IF
    END SELECT

  PRINT filenameout$(sep), sep

  OPEN filenameout$(sep) FOR OUTPUT ACCESS WRITE AS #3

END SUB

REM $DYNAMIC

```

```
SUB Espectral (MM AS INTEGER, Mfpe AS INTEGER, a() AS DOUBLE, p() AS DOUBLE, power())
```

```
  Calculo do espectro de Potencia do MEM:
```

```
  SHARED N AS INTEGER, pi#
  SHARED deltat, startlog, deltalog, Numlog
```

```
  DIM numep AS DOUBLE, pr AS DOUBLE, factorRe AS DOUBLE
  DIM factorIm AS DOUBLE, omega AS DOUBLE, sumRe AS DOUBLE
  DIM sumIm AS DOUBLE, denop AS DOUBLE, factor AS DOUBLE
  DIM i AS INTEGER, j AS INTEGER
```

```
  deltat = 1!
  numep = p(Mfpe) * deltat
```

```
  newlog = startlog
```

```
  FOR i = 1 TO Numlog
```

```
    pr = 1# / ((10#) ^ newlog)
```

```
    'Calculo do fator complexo:
```

```
    sumRe = 0#: sumIm = 0#
```

```
    FOR j = 1 TO Mfpe
```

```
      omega = -2# * pi# * j * pr * deltat
```

```
      factorRe = COS(omega)
```

```
      factorIm = SIN(omega)
```

```
      sumRe = sumRe + factorRe * a(j)
```

```
      sumIm = sumIm + factorIm * a(j)
```

```
    NEXT j
```

```
    factor = SQR((1# - sumRe) * (1# - sumRe) + sumIm * sumIm)
```

```
    denop = factor * factor
```

```
    power(MM, i) = numep / denop          'Espectro de Potencia
```

```
    newlog = newlog + deltalog
```

```
  NEXT i
```

```
END SUB
```

```
SUB ImprimePredicao (timeh(), Y(), k(), tnyaux(), opcional$, cabecalho$())
```

```
  SHARED NumMfpe AS INTEGER, MfpeMen() AS STRING * 4
```

```
  SHARED N AS INTEGER, NP AS INTEGER
```

```
  DIM lag AS INTEGER, j AS INTEGER, dime AS INTEGER
```

```
  DIM timeOO AS STRING * 12, tnyOO AS STRING * 12
```

```
  timeOO = "   --->   "
```

```
  tnyOO = "   --->   "
```

```
  valorconst$ = "(valor const. = ) "
```

```
  SELECT CASE opcional$
```

```
    CASE IS = "B"
```

```
      mensagem$ = "( Burg from SMOOTHED POLYNOMIAL TREND )"
```

```
    CASE IS = "C"
```

```
      mensagem$ = "( Burg from SMOOTHED FLUCTUATION )"
```

```
    CASE ELSE
```

```
      mensagem$ = "( Burg from SMOOTHED FLUCTUATION - TREND )"
```

```
  END SELECT
```

```
  Loop sobre cada Mfpe:
```

```
  FOR lag = 1 TO NumMfpe
```

```
    REDIM tny(k(lag), lag)
```

```
    IF k(lag) < NumMfpe THEN
```

```
      FOR j = 1 TO NumMfpe
```

```
      IF j <= k(lag) THEN SWAP tnyaux(j, lag), tny(j, lag)
```

```
      NEXT j
```

```

ELSE
  FOR j = 1 TO k(lag)
  SHAP tnyaux(j, lag), tny(j, lag)
  NEXT j
END IF

dime = k(lag) + 1

REDIM time(dime), tny0(dime), coeifr(dime), sigmar(dime), phi(dime)
REDIM sigmaphi(dime), coef1(dime), sigma1(dime)
REDIM coef2(dime), sigma2(dime), expvar(dime), Yc(N), Predi(NP)

Predicao tny(), Y(), lag, variancia, correlacao, media, time(), tny0(), coeifr(), sigmar(),
*(continua)* phi(), sigmaphi(), coef1(), sigma1(), coef2(), sigma2(), expvar(), Yc(), Predi()

' Impressao :

PRINT #3, " "; mensagem$
PRINT #3,
FOR j = 1 TO 4
  PRINT #3, cabecalho$(j)
NEXT j
PRINT #3, " Initial Time ( decimals hours ) = "; timeh(1)
PRINT #3,
PRINT #3, " 0 numero de periodos para "; MfpeMen(lag); " e igual a "; k(lag)
PRINT #3,
PRINT #3, "Variancia = "; variancia
PRINT #3, "Correlacao = "; correlacao
PRINT "0 numero do lag = "; lag; : PRINT "( LPEF = "; MfpeMen(lag); " do numero de dados)"
PRINT "Correlacao = "; correlacao
PRINT #3, "Valor medio = "; media
PRINT #3,

PRINT #3, "Period min Ny. Period Amplitude- Deviat. St Phase(rad) Deviat. St
*(continua)* Coeff. (A) Deviat. St Coeff. (B) Deviat. St Sg/Hoi (%)"

sumexpvar = 0
FOR j = 1 TO k(lag) + 1
  IF j = 1 THEN
  PRINT #3, time00; tny00; : PRINT #3, SPC(30); : PRINT #3, valorconst$; :
*(continua)* PRINT #3, USING "#####.###" "; coef1(j); sigma1(j)
  ELSE
  PRINT #3, USING "#####.###" "; time(j); tny0(j); coeifr(j); sigmar(j); phi(j);
*(continua)* sigmaphi(j); coef1(j); sigma1(j); coef2(j); sigma2(j); expvar(j)
  sumexpvar = sumexpvar + expvar(j)
  END IF
NEXT j
PRINT #3, SPC(112); : PRINT #3, "SOMATORIO="
PRINT #3, SPC(121); : PRINT #3, USING "#####.###" "; sumexpvar

PRINT #3,
PRINT #3,

NEXT lag

CLOSE #3

END SUB

SUB Inicializacao (Y(), p() AS DOUBLE, b1() AS DOUBLE, b2() AS DOUBLE)

SHARED W AS INTEGER
DIM pp AS DOUBLE, i AS INTEGER

' Inicializa a potencia de saida:

pp = 0#
FOR i = 1 TO W

```

```

    pp = pp + Y(i) * Y(i)
NEXT i

p(0) = pp / N

' Inicializa os filtros progressivos e regressivos de saida:

b1(1) = Y(1)
b2(N - 1) = Y(N)
FOR i = 2 TO N - 1
    b1(i) = Y(i)
    b2(i - 1) = Y(i)
NEXT i

END SUB

FUNCTION janela# (M AS INTEGER, i AS INTEGER)

SHARED N AS INTEGER, pi#
SHARED decisao$

IF decisao$ = "Y" THEN
    'Janela de Hamming
    janela# = .54 - .46 * COS(2 * pi# * i / (N - M) + pi# / (N - M))
    '
    '      Melhora a eficiencia do algoritmo de
    '      Burg quando aplicado as series sin() + Noise()
    '
ELSE
    janela# = 1#
END IF

END FUNCTION

SUB LeituraPeriodos (filenamein$, opcional$, k(), tnyaux())

SHARED NumMfpe AS INTEGER, passot
DIM i AS INTEGER, j AS INTEGER, mj AS INTEGER, comp AS INTEGER
DIM utny(100), potenciaw$(100)

OPEN filenamein$ FOR INPUT ACCESS READ AS #2

' Leitura das periodicidades:

comp = 24 + NumMfpe * 16 + 2 'comprimento total de um registro
i = 0: j = 0: mj = 0
DO WHILE NOT EOF(2)
    i = i + 1

    IF i <= 3 THEN
        INPUT #2, cabecalho$
    ELSE
        ' Ignora-se periodos menores do que 30 min
        '      (equivalente a filtrar Tny < 30/passot)
        ' ou ignora-se periodos menores do que 200 min
        '      (equivalente a filtrar Tny < 200/passot)

        LINE INPUT #2, u$

        u1 = VAL(MID$(u$, 1, 7))
        u2 = VAL(MID$(u$, 8, 7))
        u3 = VAL(MID$(u$, 15, 10))
        u4$ = MID$(u$, 35, comp - 34)

        SELECT CASE opcional$
        CASE IS = "B"
            IF u2 > (200# / passot) THEN
                mj = mj + 1
                utny(mj) = u2
                potenciaw$(mj) = u4$
            END IF
        END SELECT
    END IF
END DO

```

```

    END IF
CASE ELSE
    IF u2 > (30! / passot) THEN
        mj = mj + 1
        utny(mj) = u2
        potenciaw$(mj) = u4$
    END IF
END SELECT

END IF

LOOP
CLOSE #2

FOR j = 1 TO NumMfpe
    k(j) = 0
NEXT j

FOR i = 1 TO mj
    FOR j = 1 TO NumMfpe
        poweraux$ = MID$(potenciaw$(i), 1 + 16 * (j - 1), 6)
        IF poweraux$ <> " --- " THEN

            k(j) = k(j) + 1          'Numero de periodos Nyquist
            tnyaux(k(j), j) = utny(i) 'Matriz que contem os periodos Nyquist

        END IF
    NEXT j
NEXT i

END SUB

SUB Lsqcsr (x() AS DOUBLE, NOB AS INTEGER, NID AS INTEGER, Y() AS DOUBLE, b() AS DOUBLE, tss AS DOUBLE,
*(continua)*          rss AS DOUBLE, essm1 AS DOUBLE, r2 AS DOUBLE, stder AS DOUBLE,
*(continua)*          Yc(), st() AS DOUBLE, var AS DOUBLE, ybar, sstder AS DOUBLE)

' x() matriz das funcoes sin() e cos() (regressao bilinear)
' Fornece parametros estatisticos de saida

SHARED M AS INTEGER
DIM xx AS DOUBLE, yy AS DOUBLE, det AS DOUBLE, bb AS DOUBLE, ess AS DOUBLE
DIM ycr AS DOUBLE
DIM stp AS DOUBLE, stt AS DOUBLE, k AS INTEGER, i AS INTEGER, j AS INTEGER
DIM df AS INTEGER, M AS INTEGER
REDIM xpry(NID) AS DOUBLE, t(NID) AS DOUBLE, a(NID, NID) AS DOUBLE

M = NID

FOR i = 1 TO M
    FOR j = 1 TO M
        xx = 0#
        FOR k = 1 TO N
            xx = xx + x(k, i) * x(k, j)
        NEXT k
        a(i, j) = xx
        a(j, i) = xx
    NEXT j
NEXT i

FOR i = 1 TO M
    yy = 0#
    FOR k = 1 TO N
        yy = yy + x(k, i) * Y(k)
    NEXT k
    xpry(i) = yy
NEXT i

Mincsr a(), NID, det

IF det = 0# THEN

```

```

PRINT "DETERMINANTE = "; det
PRINT "Problemas Serios !!!"
END
END IF

FOR i = 1 TO M
  bb = 0#
  FOR k = 1 TO M
    bb = bb + a(i, k) * xpry(k)
  NEXT k
  b(i) = bb
NEXT i

tss = 0#
ybar = 0
FOR k = 1 TO N
  ybar = ybar + Y(k)
  tss = tss + Y(k) * Y(k)
NEXT k
ybar = ybar / N
rss = 0#
FOR i = 1 TO M
  rss = rss + b(i) * xpry(i)
NEXT i

ess = tss - rss
var = (tss / N - ybar * ybar)
df = N - M
essm1 = ess / df
stder = SQR(essm1)
sstder = SQR(var)
r2 = (rss - N * ybar * ybar) / (tss - N * ybar * ybar)

FOR i = 1 TO M
  stp = SQR(a(i, i))
  stt = stp * stder
  st(i) = stt
  t(i) = b(i) / stt
NEXT i

FOR j = 1 TO N
  ycr = 0#
  FOR i = 1 TO M
    ycr = ycr + x(j, i) * b(i)
  NEXT i
  Yc(j) = ycr
NEXT j

END SUB

SUB Maximos (power())
' Esta subrotina busca os valores de pico para
' a potencia espectral e imprime tais valores

SHARED Numlog, startlog, dotalog, passot
SHARED NumMfpe AS INTEGER
SHARED opcao$

DIM pmov(NumMfpe), amrk(NumMfpe) AS STRING * 1, pow(NumMfpe) AS STRING
DIM powerlog(NumMfpe)
DIM k AS INTEGER, j AS INTEGER, i AS INTEGER, jkk AS INTEGER
DIM jll AS INTEGER, kk AS INTEGER

k = 0
newlog = startlog
black$ = " "
aster$ = "*"

FOR i = 1 TO Numlog

  k = k + 1

```

```

plog = (10#) ^ newlog
FOR j = 1 TO NumMfpe
  IF i = 1 OR i = Numlog THEN
powerlog(j) = FNlog10(power(j, k)) 'log10 do espectro de potencia
  ELSE
poweraux = power(j, k) + power(j, k + 1)
  IF k <> 1 THEN
    poweraux = poweraux + power(j, k - 1)
    poweraux = poweraux / 3!
  ELSE
    poweraux = poweraux / 2!
  END IF
  pmov(j) = FNlog10(poweraux)
  amrk(j) = black$
  IF k = 1 THEN
    IF power(j, k) >= power(j, k + 1) THEN
      amrk(j) = aster$
      powerlog(j) = FNlog10(power(j, k))
    END IF
  ELSE
    IF power(j, k) >= power(j, k - 1) AND power(j, k) >= power(j, k + 1) THEN
      amrk(j) = aster$
      powerlog(j) = FNlog10(power(j, k))
    ELSE
      powerlog(j) = FNlog10(power(j, k))
    END IF
  END IF
  END IF
  END IF
  tempo = plog * passot
  jkk = 0
  jll = 0
  FOR jkl = 1 TO NumMfpe
    jkk = jkk + 1
    pow(jkl) = " --- "
    IF amrk(jkl) = aster$ THEN
      jll = jll + 1
      pow(jkl) = MID$(STR$(powerlog(jkl)), 1, 6)
    END IF
    IF jkk = NumMfpe AND jll <> 0 THEN
      PRINT #2, USING "###.#"; tempo; plog;
      PRINT #2, USING "#####.###"; newlog;
      PRINT #2, SPC(10);
    FOR kk = 1 TO NumMfpe - 1
      PRINT #2, pow(kk);
      PRINT #2, SPC(10);
    NEXT kk
    PRINT #2, pow(NumMfpe)
  END IF
NEXT jkl
' Escrever o arquivo completo: .dat

```

```

IF opcao$ = "A" THEN
    PRINT #6, USING "###.##"; tempo; plog;
    PRINT #6, USING "#####.##"; newlog;
    FOR l = 1 TO NumMfpe - 1
    PRINT #6, USING "###.##"; powerlog(l);
    NEXT l
    PRINT #6, USING "###.##"; powerlog(NumMfpe)
END IF

newlog = newlog + deltalog

NEXT i

CLOSE #2
CLOSE #6

END SUB

SUB Mensagens (cabecalho$())

SHARED Mfpellen() AS STRING * 4
SHARED NumMfpe AS INTEGER

' Subrotina que imprime mensagens:

PRINT #2, cabecalho$(1)
PRINT #2, cabecalho$(3)
PRINT #2, cabecalho$(4)
PRINT #2, "Numero de lags = "; : PRINT #2, USING "#"; NumMfpe; : PRINT #2, SPC(70);
*(continua)* : PRINT #2, mensagem$
PRINT #2, SPC(60); : PRINT #2, "POWER SPECTRA IN LOG(10)"
PRINT #2, "TIME(min) TMyquist LogTMyquist", SPC(10); : PRINT #2, "Lenght predictor error filter
*(continua)* (ordem do filtro de predicao) ="

FOR i = 1 TO NumMfpe - 1
    IF i = 1 THEN
        PRINT #2, SPC(36); : PRINT #2, Mfpellen(1);
    ELSE
        PRINT #2, SPC(12); : PRINT #2, Mfpellen(i);
    END IF
NEXT i

PRINT #2, SPC(12); : PRINT #2, Mfpellen(NumMfpe)
PRINT #2,

END SUB

SUB Mincsr (array() AS DOUBLE, MID AS INTEGER, det AS DOUBLE)

DIM amax AS DOUBLE, save AS DOUBLE
DIM i AS INTEGER, j AS INTEGER, jj AS INTEGER, ij AS INTEGER, kk AS INTEGER
DIM il AS INTEGER, l AS INTEGER, ja AS INTEGER, Morder AS INTEGER
REDIM ik(MID), jk(MID)

Morder = MID

' Proposito:
' Inverter uma matriz simetrica e calcular seu determinante

' Descricao dos parametros:

' array () - matriz de entrada que e substituida pela sua inversa
' morder - grau da matriz (ordem do determinante)
' det - determinante

det = 1!
FOR k = 1 TO Morder

```

' Achar o maior elemento de array (i, j) no resto da matriz:

```

amax = 0#
ciclo1:
  FOR i = k TO Norder
    FOR j = k TO Norder
      IF (ABS(amax) - ABS(array(i, j))) <= 0# THEN
        amax = array(i, j)
        ik(k) = i
        jk(k) = j
      END IF
    NEXT j
  NEXT i

```

' Permutar linhas e colunas para colocar amax em array(k,k):

```

IF amax = 0# THEN
  det = 0
  EXIT SUB
END IF

i = ik(k)
IF (i - k) < 0 THEN
  GOTO ciclo1
ELSEIF (i - k) > 0 THEN
  FOR j = 1 TO Norder
    save = array(k, j)
    array(k, j) = array(i, j)
    array(i, j) = -save
  NEXT j
END IF

j = jk(k)
IF (j - k) < 0 THEN
  GOTO ciclo1
ELSEIF (j - k) > 0 THEN
  FOR i = 1 TO Norder
    save = array(i, k)
    array(i, k) = array(i, j)
    array(i, j) = -save
  NEXT i
END IF

```

' Acumular elementos da matriz inversa:

```

FOR i = 1 TO Norder
  IF (i - k) <> 0 THEN array(i, k) = -array(i, k) / amax
NEXT i

FOR i = 1 TO Norder
  FOR j = 1 TO Norder
    IF (i - k) <> 0 THEN
      IF (j - k) <> 0 THEN
        array(i, j) = array(i, j) + array(i, k) * array(k, j)
      END IF
    END IF
  NEXT j
NEXT i

FOR j = 1 TO Norder
  IF (j - k) <> 0 THEN
    array(k, j) = array(k, j) / amax
  END IF
NEXT j

array(k, k) = 1# / amax
det = det * amax
NEXT k

```

'Restaurar a ordem da matriz:

```

FOR l = 1 TO Norder
  k = Norder - l + 1
  j = ik(k)
  IF (j - k) > 0 THEN
    FOR i = 1 TO Norder
      save = array(i, k)
      array(i, k) = -array(i, j)
      array(i, j) = save
    NEXT i
  END IF
  i = jk(k)
  IF (i - k) > 0 THEN
    FOR j = 1 TO Norder
      save = array(k, j)
      array(k, j) = -array(i, j)
      array(i, j) = save
    NEXT j
  END IF
NEXT l

EXIT SUB

sai2:

PRINT "A matriz inversa nao pode ser calculada por este metodo:"
PRINT "Imprimir o determinante : ", det
STOP
det = 0#

END SUB

SUB Potencia (N AS INTEGER, b1() AS DOUBLE, b2() AS DOUBLE, p() AS DOUBLE, a() AS DOUBLE)
' Algoritmo de Burg : Expressao para os coeficientes de reflexao

SHARED N AS INTEGER

DIM nume AS DOUBLE, deno AS DOUBLE
DIM i AS INTEGER

FOR i = 1 TO N - 1
  nume = nume + b1(i) * b2(i) * janela#(N, i)
  deno = deno + (b1(i) * b1(i) + b2(i) * b2(i)) * janela#(N, i)
NEXT i

a(N) = 2# * nume / deno

' Formula recursiva para a potencia do FPE

p(N) = p(N - 1) * (1 - a(N) * a(N))

END SUB

SUB Predicao (tny(), Y(), lag AS INTEGER, variancia, correlacao, media, time(), tny0(),
*(continua)*      coepr(), sigmar(), phi(), signaphi(), coef1(), sigmal(), coef2(),
*(continua)*      sigma2(), expvar(), Yc(), Predi())

'Dados de Entrada:

' Y()          --- serie temporal
' tny(,)      --- periodos do Nyquist para varios lags (.5 - Hz)
' passo      --- valor do passo da serie temporal (const.)
' lag         --- numero do Hfpe

'Dados de Saida:

' variancia   --- variancia da serie reconstruida
' correlacao  --- quadrado do coeficiente de correlacao multipla

```

```

' media          --- media da serie
' time()         --- conteudo espectral em 1/frequencia
' tny0()         --- conteudo espectral em 1/frequencia de Nyquist
' coefr(),phi() --- yc() = RMS + coefr() * cos ( 2 * pi * i / tny() + phi() )
' coef1,2 ( )   --- yc() = coef1() * cos ( 2 * pi * i / tny() + phi() ) +
'               coef2() * sin ( 2 * pi * i / tny() + phi() )
' signal,2,r ( ) --- desvios de coef1,2,r respectivamente
' expvar()      --- relacao Sinal/Ruido
' Yc()          --- reconstrucao da serie
' predi()       --- possivel existencia de valores alem dos limites da serie

SHARED passot
SHARED # AS INTEGER      'U: numero de registros
SHARED #P AS INTEGER    'UP: numero de registros para predicao alem
' do limite da serie temporal original
SHARED pi$

DIM ik AS INTEGER, ikk AS INTEGER, ii AS INTEGER
DIM M AS INTEGER, NOC AS INTEGER, jj AS INTEGER, jm AS INTEGER, aj AS INTEGER
DIM i AS INTEGER, j AS INTEGER, MM AS INTEGER, n1 AS INTEGER, nb AS INTEGER
DIM rr AS DOUBLE, dphi1 AS DOUBLE, dphi2 AS DOUBLE

' M --- numero de periodos (from Burg)
' NOC --- numero de valores para calculo NOC = M + #P

' O numero de periodos de Nyquist presentes:
M = UBOUND(tny, 1)
NOC = M + #P
MM = 2 * M + 1

REDIM x(NOC, MM) AS DOUBLE, a(MM, MM) AS DOUBLE, xpry(MM) AS DOUBLE
REDIM st(MM) AS DOUBLE, t(MM) AS DOUBLE, bt(MM) AS DOUBLE, b(MM) AS DOUBLE
REDIM ic(MM) AS LONG, ir(MM) AS LONG, s(MM) AS DOUBLE
DIM tss AS DOUBLE, rss AS DOUBLE, essm1 AS DOUBLE, r2 AS DOUBLE
DIM var AS DOUBLE, sstder AS DOUBLE, stder AS DOUBLE

' Funcao para o calculo dos minimos quadrados:

FOR j = 1 TO #
  x(j, 1) = 1$
  aj = j

  FOR i = 1 TO M
    jj = 2 * i
    jm = jj + 1
    x(j, jj) = COS((2 * pi$ * aj) / tny(i, lag))
    x(j, jm) = SIN((2 * pi$ * aj) / tny(i, lag))
  NEXT i
NEXT j

' Parametros de Entrada :
' Y() , NOC , MM , x()

Lsqcsr x(), NOC, MM, Y(), b(), tss, rss, essm1, r2, stder, Yc(), t(), var, ybar, sstder

' Parametros importantes de saida:

' r2 : coeficiente de correlacao multipla da serie temporal
' var : variancia da serie temporal
' ybar : valor medio da serie temporal
' Yc() : reconstrucao da serie temporal

variancia = var
correlacao = r2
media = ybar

tny0(1) = 1!
time(1) = passot * tny0(1)
coefr(1) = 0
sigmar(1) = 0
phi(1) = 0

```

```

sigmaphi(1) = 0
coef1(1) = b(1)
sigma1(1) = t(1)
coef2(1) = 0
sigma2(1) = 0
expvar(1) = 0

ik = 1
ikk = 0

FOR i = 2 TO MM STEP 2

    ii = i + 1
    ik = ik + 1
    ikk = ikk + 1

    tny0(ik) = tny(ikk, lag)
    time(ik) = tny0(ik) * passot
    rr = SQR(b(i) * b(i) + b(ii) * b(ii))
    coefr(ik) = rr

' A relacao sinal-ruído definida como o quociente entre
' o valor medio quadratico do sinal (para uma dada frequencia)
' e o valor medio quadratico do ruído (variancia da serie)
' indica quao bem o sinal aparece no ruído: expvar

    expvar(ik) = (rr * rr / 2) / variancia * 100!
    sigmar(ik) = SQR(b(i) * b(i) * t(i) * t(i) + b(ii) * b(ii) * t(ii) * t(ii)) / rr
    phi(ik) = atan2#(b(ii), b(i))
    dphi1 = b(ii) / (b(i) * b(i) + b(ii) * b(ii))
    dphi2 = -b(i) / (b(i) * b(i) + b(ii) * b(ii))
    sigmaphi(ik) = SQR(t(i) * t(i) * dphi1 * dphi1 + t(ii) * t(ii) * dphi2 * dphi2)
    coef1(ik) = b(i)
    sigma1(ik) = t(i)
    coef2(ik) = b(ii)
    sigma2(ik) = t(ii)
NEXT i

' Parte do programa que estende a reconstrucao alem dos limites
' da serie temporal original (predicao):

IF NOC = 0 THEN EXIT SUB

n1 = N + 1

FOR j = n1 TO MOC
    sum = 0!

    FOR i = 1 TO IM
        sum = sum + b(i) * x(j, i)
    NEXT i

    Predi(j) = sum

NEXT j

nb = 0

'Intervalo de confianca:

inicia:

sumi = 0!
n1 = n1 + nb

FOR i = 1 TO MM
    sumj = 0!

    FOR j = 1 TO MM
        sumj = sumj + a(i, j) * x(n1, j)
    NEXT j

```

```

    sumi = sumi + x(n1, i) * sumj
NEXT i

sumi = SQR(sumi)
conf = stder * sumi

'Imprime stder, fator de predicao ** sumi ** ,desvio padrao da predicao **conf**

IF nb < 20 THEN
    nb = nb + 1
    GOTO inicia
END IF

END SUB

SUB Recursiva (M AS INTEGER, a() AS DOUBLE, aa() AS DOUBLE)

SHARED N AS INTEGER

' Algoritmo de recursao de Levinson (AR)

FOR i = 1 TO M - 1
    a(i) = aa(i) - a(M) * aa(M - i)
NEXT i

END SUB

SUB Recursivb (M AS INTEGER, aa() AS DOUBLE, a() AS DOUBLE, b1() AS DOUBLE, b2() AS DOUBLE)

SHARED N AS INTEGER
DIM i AS INTEGER

' Calcula a saida dos filtros progressivos e regressivos

FOR i = 1 TO N
    aa(i) = a(i)
NEXT i

FOR i = 1 TO N - M
    b1(i) = b1(i) - aa(M - 1) * b2(i)
    b2(i) = b2(i + 1) - aa(M - 1) * b1(i + 1)
NEXT i

END SUB

```

—— FIM DO TERCEIRO PROGRAMA ——

Obs.: A identificação *(continua)* nas listagens de programa referem-se ao fato de que a linha de programação é única, devendo ser continuada. Esta identificação deve ser eliminada caso deseje-se implementar os programas.