



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-6968-TDI/656

**RECONSTRUÇÃO DE PROPRIEDADES ÓTICAS E DE FONTES
DE BIOLUMINESCÊNCIA EM ÁGUAS NATURAIS**

Stephan Stephany

Tese de Doutorado em Computação Aplicada, orientada pelo Dr. Fernando Manuel Ramos e pelo Dr. Haroldo Fraga Campos Velho, aprovada em abril de 1997.

INPE
São José dos Campos
1988

↓

Publicado por:

Coordenação de Ensino, Documentação e
Programas Especiais - CEP

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Caixa Postal 515

12201-970 - São José dos Campos - SP - Brasil

Fone: (012) 345.6911

Fax: (012) 345.6919

E-Mail: marciana@sid.inpe.br

- Solicita-se intercâmbio
- We ask for exchange
- Si sollecita intercambio
- On demande l'échange
- Mann bittet un Austausch
- Pidese canje
- Просим обмена
- 歡迎著作交換
- 出校物交換のお願い

Publicação Externa - É permitida sua reprodução para interessados.

TÍTULO
Reconstrução de Propriedades Óticas e de Fontes de Bioluminescência em Água Noturna

AUTOR
Stephan Stepien

ORIENTADOR
Fernando Manuel Ramos e Haroldo Fraga Campos Velho

ORIGEM: SPG CURSO: CAP SÉRIE: — TIPO: TESE DISSERTAÇÃO APRESENTAÇÃO: 01/04/97

Nº DE PÁGINAS: 144 Nº DE FOTOS: — Nº DE MAPAS: — LISTA DE DISTRIBUIÇÃO ANEXA

REVISÃO TÉCNICA
CONCLUÍDA EM 15/4/97
ASSINATURA DO ORIENTADOR

REVISÃO DE LINGUAGEM
 SOLICITADA DISPENSADA
Nº _____
RECEBIDA ___/___/___ DEVOLVIDA ___/___/___
ASSINATURA DO REVISOR

AUTORIZAÇÃO FINAL
___/___/___
ASSINATURA

PALAVRAS-CHAVE
computação aplicada, problemas inversos, transferência radiativa, ótica hidrológica

PÓS-GRADUAÇÃO
ENCAMINHADO POR: ___/___/___ RECEBIDO ___/___/___ DEVOLVIDO ___/___/___
DEVOLVIDO POR: _____

CONTROLE E DIVULGAÇÃO
RECEBIDO POR: _____ DEVOLVIDO PARA: _____
PRONTO PARA PUBLICAÇÃO EM ___/___/___ Nº INPE-6868-TDI/656 QUANT. _____
519.688:535.2
ASSINATURA

OBSERVAÇÕES

INSTRUÇÕES PARA PREENCHIMENTO

- TÍTULO DA PUBLICAÇÃO: COMPLETO, EVITANDO ABREVIAR PALAVRAS.
- NOME DO AUTOR E DO ORIENTADOR: COMPLETO, POR EXTENSO, DA MESMA FORMA QUE IRÁ CONSTAR DA PUBLICAÇÃO.
- ORIGEM DA PUBLICAÇÃO: SIGLA DO ÓRGÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO, SEGUIDA DA SIGLA DA UNIDADE, CONFORME A ESTRUTURA ORGANIZACIONAL DO INPE.
- CURSO: NOME OU SIGLA DO CURSO DE ACORDO COM A ESTRUTURA DE DIVISÃO DE TRABALHO DO INPE.
- SÉRIE: PROPOSTA PELO AUTOR, ENTRE AS APROVADAS PELO INSTITUTO.
- DATA DE APRESENTAÇÃO: COLOCAR A DATA DA APROVAÇÃO FINAL.
- NÚMERO DE PÁGINAS, FOTOS, MAPAS OU OUTROS MATERIAIS: NÚMERO EXATO DE CADA UM DELES.
- REVISÕES TÉCNICA E/OU DE LINGUAGEM: SOLICITADA OU DISPENSADA PELO ORIENTADOR OU CONFORME SUGESTÃO DA BANCA EXAMINADORA. DATAS E ASSINATURAS DE RECEBIMENTO E DEVOLUÇÃO DO ORIENTADOR E/OU DO REVISOR DE LINGUAGEM.
- AUTORIZAÇÃO FINAL: DATA E ASSINATURA DO TITULAR DA UNIDADE DIRETAMENTE SUBORDINADA À DIREÇÃO GERAL.
- PALAVRAS-CHAVE: INICIADAS PELOS CONCEITOS PRINCIPAIS, SEGUIDOS DOS TERMOS ESPECÍFICOS.
- PÓS-GRADUAÇÃO: NOME DA PESSOA QUE ENCAMINHA O TRABALHO, DATA E ASSINATURA; DATA DE DEVOLUÇÃO QUANDO HOVER.
- CONTROLE E DIVULGAÇÃO: NOME DA PESSOA QUE RECEBE O TRABALHO, DATA DE RECEBIMENTO, ASSINATURA E DATA DE DEVOLUÇÃO PARA CORREÇÕES, SE NECESSÁRIO. DATA, NÚMERO E QUANTIDADE DE CÓPIAS PARA REPRODUÇÃO.
- OBSERVAÇÕES: INFORMAÇÕES RELEVANTES.

PARA:	Sra. Marciana Leite Ribeiro	NOSSA REF.	SPG-360/97	SUA REF.	- 375
DE:	Adelio Gurgel do Amaral		14 / 05 / 97	RAMAL	6845

ASSUNTO

Publicação de Tese

TEXTO

O Sr. Stephan Stephany, em consonância com o disposto na Resolução RE/DIR-261, manifestou ao Serviço de Pós-Graduação, com a anuência dos seus orientadores, Drs. Fernando Manuel Ramos e Haroldo Fraga de Campos Velho, o interesse na publicação de sua tese intitulada "*Reconstrução de propriedades óticas e de fontes bioluminescência em águas naturais.*", por ele defendida em 01.04.97.

Assim, estou passando às suas mãos a versão definitiva da tese do Sr. Stephan Stephany, que ele considera em condições de ser publicada, para as providências cabíveis.

Tendo em vista tratar-se de original que será, posteriormente, objeto de encadernação para depósito definitivo do SPG, solicito os seus bons ofícios no sentido de evitar, sempre que possível, anotações de qualquer natureza na tese, bem como a sua devolução a este Serviço tão logo haja sido concluído o processo de publicação.

Estou encaminhando ainda cópia de correspondência dirigida pelo Sr. Stephan Stephany ao Serviço de Pós-Graduação, onde figura o seu endereço e/ou telefone, para o caso de haver necessidade de algum contato.

Colocando-nos ao seu dispor para outros esclarecimentos que se fizerem necessários, subscrevo-me.

Atenciosamente,



Adelio Gurgel do Amaral
Chefe do Serviço de Pós-Graduação

/AGA



São José dos Campos, de de 1997.

De : Stephan Stephany
Fernando Manuel Ramos
Haroldo Fraga de Campos Velho

Para : Chefe do Serviço de Pós-Graduação

Assunto : Publicação de Tese

Prezada Senhora,

Em conformidade com o que dispõe o Anexo à Resolução RE/DIR-261, de 25.02.93, vimos pelo presente manifestar ao Serviço de Pós-Graduação do INPE o nosso desejo de que a tese intitulada "*Reconstrução de propriedades óticas e de fontes bioluminescência em águas naturais.*" defendida em 01.04.97 pelo Sr. Stephan Sephany, um dos signatários,

Seja publicada pelo INPE.

Não seja publicada pelo INPE.

Estamos cientes que, em caso de opção por publicar, o trabalho deverá ser entregue no Serviço de Pós-Graduação, até 02.06.97, em conformidade com o que dispõe o Manual de Normas para Publicação Técnico-Científica (INPE-5116-MAN/001).

Atenciosamente,

Stephan Stephany
Doutorando
Av. Nove de Julho, 1027 Apto. 1303
Vila Adyanna
12243-000 São José dos Campos
☎ INPE 6356

Fernando Manuel Ramos
Orientador

Haroldo Fraga de Campos Velho
Orientador

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

INPE-6968-TDI/656

**RECONSTRUÇÃO DE PROPRIEDADES ÓTICAS E DE FONTES
DE BIOLUMINESCÊNCIA EM ÁGUAS NATURAIS**

Stephan Stephany

Tese de Doutorado em Computação Aplicada, orientada pelo Dr. Fernando Manuel Ramos e pelo Dr. Haroldo Fraga Campos Velho, aprovada em abril de 1997.

INPE
São José dos Campos
1998

519.688 : 535.2

STEPHANY, S.

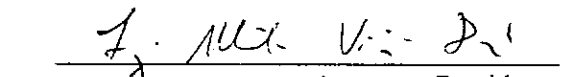
Reconstrução de propriedades óticas e de fontes de bioluminescência em águas naturais / S. Stephany – São José dos Campos: INPE, 1997.

144p. – (INPE-6968-TDI/656).

1.Computação aplicada. 2.Problemas inversos.
3.Transferência radiativa. 4.Ótica hidrológica. I.Título.

Aprovada pela Banca Examinadora em
cumprimento a requisito exigido para a
obtenção do Título de Doutor em Computação
Aplicada


Dr. Luiz Alberto Vieira Dias


Presidente

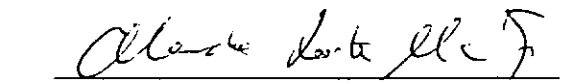
Dr. Fernando Manuel Ramos


Orientador

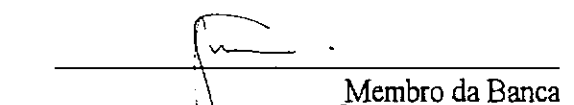
Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho


Orientador


Dr. Alexandre Souto Martinez


Membro da Banca


Dra. Evlyn Marcia Leão de Moraes Novo


Membro da Banca

Dr. Marco Túlio Menna Barreto de Vilhena


Membro da Banca

Dr. Roberto David Martinez Garcia


- Convidado -
Membro da Banca
- Convidado -

Candidato: Stephan Stephany

“We are all apprentices in a craft where no-one ever becomes a master.”

- Ernest Hemingway

À minha espôsa *Anita*.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus orientadores, Drs. **Fernando Manuel Ramos** e **Haroldo Fraga de Campos Velho**, pelo apoio e competente orientação, e aos Drs. **Luiz Alberto Vieira Dias** (UNIVAP) e **Tatuo Nakanishi** (OMEC), por me levarem a trilhar a senda acadêmica, bem como ao Dr. **Curtis D. Mobley**, da Sequoia Scientific Inc., que gentilmente cedeu o código Hidrolight e prestou colaboração. Agradeço também à **FAPESP**, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, pelo apoio fornecido através do Projeto Temático 96/07200-8.

RESUMO

Este trabalho propõe uma metodologia de estimação de propriedades óticas e de fontes de bioluminescência em águas naturais a partir de irradiâncias medidas *in situ*. Utiliza-se um algoritmo de inversão *implícito*, no qual avalia-se, para cada solução candidata, a diferença quadrática entre as irradiâncias experimentais e aquelas calculadas pelo modelo direto para essa solução. A função objetivo a ser minimizada é avaliada pela soma dessa diferenças quadráticas e o problema de minimização é formulado como um problema de otimização não-linear. Para dados com ruído, acrescenta-se um termo de regularização por máxima entropia, ponderado por um multiplicador de Lagrange, sendo avaliados dois critérios distintos para escolha do mesmo. O decaimento das irradiâncias com a profundidade foi corrigido através de um fator exponencial. A metodologia foi testada para dados sintéticos, sem ruído ou corrompidos por ruído gaussiano, com bons resultados. Os casos abordados incluíram estimação isolada de perfis de bioluminescência, de perfis do coeficiente de absorção ou do coeficiente de espalhamento e também a estimação conjunta desses parâmetros.

RECONSTRUCTION OF OPTICAL PROPERTIES
AND BIOLUMINESCENCE SOURCES
IN NATURAL WATERS.

ABSTRACT

It is proposed a methodology for the estimation of optical properties and bioluminescence sources in natural waters from *in situ* irradiances. The implicit inversion algorithm evaluates for each candidate solution the square differences between the irradiances calculated by the direct model for each candidate solution and the experimental irradiances. The objective function value for each step is given by these square differences and the minimization problem is formulated as a non-linear optimization problem. A maximum-entropy regularization term is added to the objective function for noise corrupted data. This term is weighted by a Lagrange multiplier and two criteria are evaluated for its fitting. As the irradiances decay with the depth, an exponential correction factor is used. The proposed methodology was tested for noiseless and noise-corrupted synthetic data and yielded good results. The test cases included estimation of bioluminescence, absorption coefficient or scattering coefficient vertical profiles, as well as joint estimation of all these parameters.

SUMÁRIO

	Pág.
LISTA DE FIGURAS	xvii
LISTA DE TABELAS	xxi
CAPÍTULO 1 INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 O MODELO DIRETO	5
2.1 Alguns Conceitos em Ótica Hidrológica	5
2.2 Propriedades Óticas Inerentes da Água	8
2.3 A Equação de Transferência Radiativa	13
2.4 Metodologias de Resolução	15
2.4.1 Discretização Polar e Azimutal	16
2.4.2 Decomposição “Espectral”	16
2.5 Teoria de Inserção Invariante (<i>Invariant Imbedding</i>)	18
2.5.1 Formulação de Inserção Invariante	18
2.5.2 Equações de Riccati	20
2.5.3 Regras de Inserção Invariante	23
2.6 O código Hydrolight	26
CAPÍTULO 3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA INVERSO	29
3.1 Problemas Inversos em Ótica Hidrológica	29
3.1.1 Métodos Explícitos	29
3.1.2 Métodos Implícitos	30
3.2 Metodologia Iterativa Adotada	31
3.2.1 Fator de Correção Relativa à Profundidade	33
3.3 Técnicas de Regularização	34
3.3.1 Regularização de Tikhonov	35

3.3.2	Regularização Entrópica	35
3.3.3	Escolha do Parâmetro de Regularização	36
CAPÍTULO 4 ESTIMAÇÃO DE FONTES DE BIOLUMINESCÊNCIA		39
4.1	Fontes Internas de Luz	39
4.1.1	Espalhamento de Raman	39
4.1.2	Fluorescência	40
4.2	Bioluminescência	40
4.3	Resultados Numéricos	42
4.3.1	Caso 1 - Perfil Gaussiano Determinado	43
4.3.2	Caso 2 - Perfil Gaussiano Arbitrário	44
4.3.3	Caso 3 - Perfil Não-Gaussiano	46
4.3.4	Análise dos Resultados Obtidos	48
CAPÍTULO 5 ESTIMAÇÃO DE PROPRIEDADES ÓTICAS INERENTES		65
5.1	Casos Abordados	65
5.2	Estimação de Perfis de Absorção	66
5.3	Estimação de Perfis de Espalhamento	81
5.4	Síntese dos Resultados na Estimação Isolada de Perfis de Absorção e de Espalhamento	95
5.5	Estimação Conjunta dos Coeficientes de Absorção e de Espalhamento	96
5.5.1	Estimação Conjunta de Valores Únicos e do Perfil de Bioluminescência	97
5.5.2	Estimação Conjunta de Perfis Verticais com Ruído	100
5.5.3	Estimação Conjunta de Perfis Verticais e do Perfil de Bioluminescência com Ruído	105
CAPÍTULO 6 CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS FINAIS		111
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		117

LISTA DE FIGURAS

		Pág.
2.1	Feixe de luz infinitesimal utilizado na definição da radiância L	6
2.2	Instrumento usado na medida da radiância espectral L numa dada direção $\vec{\xi}$	6
2.3	Instrumentos dispostos de forma a medir as irradiâncias descendentes: sensor plano (E_d) e sensor esférico (E_{0d}).	8
2.4	Modelo esquemático do problema considerado.	9
2.5	Geometria utilizada na definição das IOP's (para ângulo azimutal $\phi = 0$).	11
2.6	Discretização polar e azimutal em quads.	17
2.7	Operadores procurados e domínio de integração para as equações de Riccati.	22
2.8	Operadores padrão \hat{R} e \hat{T} e radiâncias incidentes e emergentes \hat{L} para camada genérica de água desprovida de condições de contorno. . . .	23
2.9	Operadores \hat{R} e \hat{T} e radiâncias incidentes e emergentes \hat{L} para a camada genérica com interface ar-água.	25
3.1	Modelo Direto e Modelo Inverso	30
4.1	Perfil vertical de irradiâncias plana e escalar descendentes, sem bioluminescência (caso 1).	49
4.2	Perfil vertical de irradiâncias plana e escalar ascendentes, sem bioluminescência (caso 1).	50
4.3	Perfil vertical de irradiâncias plana e escalar descendentes, com bioluminescência (caso 1).	51
4.4	Perfil vertical de irradiâncias plana e escalar ascendentes, com bioluminescência (caso 1).	52
4.5	Influência da bioluminescência no perfil vertical de irradiâncias planas (caso 1, irradiâncias em escala logarítmica).	53
4.6	Influência da bioluminescência no perfil vertical de irradiâncias escalares (caso 1, irradiâncias em escala logarítmica).	54
4.7	Influência do ruído para 10 fontes e desvio padrão de 0.75 (caso 1). . .	55

4.8	Influência do ruído para 10 fontes e desvio padrão de 0.75 (caso 2).	56
4.9	Influência do ruído para 10 fontes e desvio padrão de 0.75 (caso 3).	57
4.10	Decaimento dos valores da função objetivo e do erro RMS em função do número de iterações no caso 1 (10 fontes, desvio padrão de 0.75, sem ruído).	58
4.11	Decaimento dos valores da função objetivo e do erro RMS em função do número de iterações no caso 2 (10 fontes, desvio padrão de 0.75, com ruído de 2%).	59
4.12	Influência do número de fontes (N_p), para ruído de 2% e desvio padrão de 0.75 (caso 2).	60
4.13	Influência do desvio padrão (dp), para ruído de 2% e 10 fontes (caso 2).	61
4.14	Influência do número de fontes (N_p), para ruído de 2% e desvio padrão de 0.75 (caso 3).	62
4.15	Influência do desvio padrão (dp), para ruído de 2% e 10 fontes (caso 3).	63
5.1	Perfil constante de absorção sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade <i>EXP</i>	71
5.2	Perfil constante de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia (com uso do fator <i>EXP</i>).	72
5.3	Perfil constante de absorção com ruído: comparação dos critérios de regularização por máxima entropia (com uso do fator <i>EXP</i>).	73
5.4	Perfil variável de absorção sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade.	74
5.5	Perfil variável de absorção sem ruído: comparação entre os fatores <i>EXP</i> e <i>BBL</i>	75
5.6	Perfil variável de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia <i>TE</i> (com uso do fator <i>EXP</i>).	76
5.7	Perfil variável de absorção com ruído: influência de γ na regularização por máxima entropia pelo critério <i>TE</i> (com uso do fator <i>EXP</i>).	77
5.8	Perfil variável de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia <i>ST</i> (com uso do fator <i>EXP</i>).	78
5.9	Perfil variável de absorção com ruído: comparação de critérios de regularização por máxima entropia (com uso do fator <i>EXP</i>).	79
5.10	Perfil variável de absorção com ruído: uso de regularização por máxima entropia <i>ST</i> sem fator de correção relativo à profundidade.	80

5.11	Perfil constante de espalhamento sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade.	85
5.12	Perfil constante de espalhamento sem ruído: estimação sem fator algum e esquema híbrido com o fator <i>EXP</i>	86
5.13	Perfil constante de espalhamento: estimação para dados sem ruído e com ruído de 2% (ambos sem fator de correção).	87
5.14	Perfil constante de espalhamento com ruído: comparação entre <i>TE</i> e <i>ST</i> , ambos sem fator de correção.	88
5.15	Perfil constante de espalhamento com ruído: comparação entre <i>TE</i> e <i>ST</i> , ambos com fator <i>EXP</i>	89
5.16	Perfil constante de espalhamento com ruído: estimação sem/com fator <i>EXP</i> , ambos com critério <i>ST</i>	90
5.17	Perfil variável de espalhamento sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade.	91
5.18	Perfil variável de espalhamento com ruído: influência da regularização <i>ST</i> (sem fator de correção).	92
5.19	Perfil variável de espalhamento com ruído: influência da regularização <i>TE</i> (sem fator de correção).	93
5.20	Perfil variável de espalhamento com ruído: comparação dos critérios <i>TE</i> e <i>ST</i> (sem fator de correção).	94
5.21	Estimações sucessivas do perfil de absorção (2% de ruído, sem bioluminescência).	103
5.22	Estimações sucessivas do perfil de espalhamento (2% de ruído, sem bioluminescência).	104
5.23	Estimações sucessivas do perfil de absorção (2% de ruído, com bioluminescência).	108
5.24	Estimações sucessivas do perfil de espalhamento (2% de ruído, com bioluminescência).	109
5.25	Estimações sucessivas do perfil de bioluminescência (2% de ruído, com bioluminescência).	110

LISTA DE TABELAS

		Pág.
2.1	Propriedades óticas selecionadas para diferentes tipos de água, para $\lambda = 514 \text{ nm}$	13
4.1	Influência do ruído no caso 1 ($N_p = 10, \sigma = 0.75$): valores iniciais e finais da função objetivo.	43
4.2	Influência do ruído no caso 1 ($N_p = 10, \sigma = 0.75$): valores normalizados da função objetivo e do erro RMS.	43
4.3	Influência do ruído no caso 2 ($N_p = 10, \sigma = 0.75$): valores iniciais e finais da função objetivo.	44
4.4	Influência do ruído no caso 2 ($N_p = 10, \sigma = 0.75$): valores normalizados da função objetivo e do erro RMS.	45
4.5	Influência do desvio padrão no caso 2 ($N_p = 10$, dados com 2% ruído): valores iniciais e finais da função objetivo.	45
4.6	Influência do desvio padrão no caso 2 ($N_p = 10$, dados com 2% ruído): valores normalizados da função objetivo e do erro RMS.	45
4.7	Influência do número de fontes no caso 2 ($\sigma = 0.75$, dados com 2% ruído): valores iniciais e finais da função objetivo.	45
4.8	Influência do número de fontes no caso 2 ($\sigma = 0.75$, dados com 2% ruído): valores normalizados da função objetivo e do erro RMS.	46
4.9	Influência do ruído no caso 3 ($N_p = 10, \sigma = 0.75$): valores iniciais e finais da função objetivo.	46
4.10	Influência do ruído no caso 3 ($N_p = 10, \sigma = 0.75$): valores normalizados da função objetivo e do erro RMS.	47
4.11	Influência do desvio padrão no caso 3 ($N_p = 10$, dados com 2% ruído): valores iniciais e finais da função objetivo.	47
4.12	Influência do desvio padrão no caso 3 ($N_p = 10$, dados com 2% ruído): valores normalizados da função objetivo e do erro RMS.	47
4.13	Influência do número de fontes no caso 3 ($\sigma = 0.75$, dados com 2% ruído): valores iniciais e finais da função objetivo.	47
4.14	Influência do número de fontes no caso 3 ($\sigma = 0.75$, dados com 2% ruído): valores normalizados da função objetivo e do erro RMS.	48

5.1	Perfil constante de absorção sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade <i>EXP</i>	69
5.2	Perfil constante de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia, pelos critérios de tentativa-e-erro (<i>TE</i>) e de Sena e Toksöz (<i>ST</i>), fazendo-se uso do fator <i>EXP</i> em todos os casos.	69
5.3	Perfil variável de absorção sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade e comparação entre os fatores <i>EXP</i> e <i>BBL</i>	69
5.4	Perfil variável de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia <i>TE</i> , com o fator de correção <i>EXP</i>	70
5.5	Perfil variável de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia <i>ST</i> , com o fator de correção <i>EXP</i>	70
5.6	Perfil variável de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia <i>ST</i> , sem utilização de fator de correção relativo à profundidade.	70
5.7	Perfil constante de espalhamento sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade.	83
5.8	Perfil constante de espalhamento com ruído: estimações sem/com fator <i>EXP</i> e utilizando critérios <i>TE</i> ou <i>ST</i>	84
5.9	Perfil variável de espalhamento sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade.	84
5.10	Perfil variável de espalhamento com ruído: influência da regularização.	84
5.11	Resultados da estimação conjunta de valores únicos de <i>a</i> e <i>b</i> e do perfil de bioluminescência.	100

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A Ciência sempre buscou explicar os diferentes fenômenos físicos através de teorias consistentes, de forma a não somente interpretá-los, mas também derivar leis que permitissem prever fatos e comportamentos relevantes. Geralmente, no cerne dos paradigmas vigentes estão os modelos matemáticos criados, que lhes dão legitimidade, tão intimamente ligados àqueles que criador e criatura quase se confundem. À luz de novos modelos, novas teorias se sucedem e estas estabelecem-se como sendo os olhos com os quais os fenômenos serão observados e interpretados.

O fenômeno da **luz** talvez seja o mais expressivo, na história da Ciência, dessa busca. Inicialmente identificou-se a luz como uma onda, na era pre-newtoniana, visão que paulatinamente foi sendo abandonada pela teoria corpuscular de Issac Newton. Retomou-se a teoria ondulatória da luz com Thomas Young e Augustin J. Fresnel graças à sua explicação da nova situação de *interferência* sofrida pela luz ao passar por uma dupla fenda. Consolidando uma tendência da época, James C. Maxwell, em seu *Tratado sobre Eletricidade e Magnetismo*, incorporou a Ótica à gama de fenômenos eletromagnéticos.

A teoria corpuscular ressurgiu em parte com os fótons de Einstein, surgidos com base na quantificação da energia expressa por $E = nh\nu$ (onde $n = 1, 2, \dots$; ν é a frequência, h é a constante de Planck), usada para explicar o efeito fotoelétrico, no alvorecer do século XX. Uma adaptação da teoria de Boltzmann, desenvolvida por Schuster (1905) e Schwarzschild (1906), para a cinética dos gases, passou a descrever a dinâmica de um *gás de fótons*, a qual ficou conhecida como *teoria de transporte* (11). Esta teoria tem se mostrado uma aproximação válida para uma ampla variedade de fenômenos relacionados à luz, inclusive em Ótica Hidrológica (33).

Quer se adote a teoria ondulatória ou a corpuscular para melhor explicar o fenômeno da luz, estas descrições constituem a base do que se convencionou chamar o **problema direto** da ótica, em que dadas as causas, acham-se os efeitos, através da resolução da *equação de transferência radiativa*. Dadas as condições iniciais e de fronteira, incluindo as intensidades de energia radiante incidentes e geradas por fontes internas, e as *propriedades óticas* do meio, o modelo matemático direto leva às intensidades de energia radiante resultantes, expressando a interação da luz com o meio e modelando fenômenos como a absorção e o espalhamento. A complexidade da equação de transferência radiativa traduz-se na vasta literatura disponível (52) (17) (26).

A intensidades de energia radiante expressa potência por unidade de ângulo sólido, embora usualmente se utilizem grandezas como a *radiância*, corres-

pondente à potência por unidade de área e de ângulo sólido, e a *irradiância*, potência por unidade de área, cujas definições são lembradas adiante.

Conhecido o problema direto, caracteriza-se o **problema inverso** da ótica: dadas as intensidades de energia radiante obtidas, por exemplo através de medições experimentais distribuídas espectral ou espacialmente, pode-se elencar como incógnitas algumas (ou todas) propriedades óticas do meio, ou então as condições iniciais, ou as de fronteira, ou ainda as fontes internas.

Problemas inversos são difíceis, pois não asseguram existência, unicidade e estabilidade da solução (61) (59) (62), o que os caracteriza como *mal-postos*. A presença de ruído nos dados experimentais torna-os ainda mais difíceis, levando a soluções instáveis, que se traduzem por oscilações de caráter não-físico nas distribuições espaciais estimadas de um dado parâmetro. Este tipo de instabilidade numérica levou ao desenvolvimento de inúmeras técnicas de regularização (39) (60) (62) destinadas a suavizar as curvas.

As primeiras tentativas de resolução de problemas inversos datam do fim do século passado, com os trabalhos de Lord Rayleigh. Num trabalho recente, N.J. McCormick (30) apresentou uma revisão dos tipos problemas e dos métodos de inversão na área da transferência radiativa. Nesta classe de problemas, conforme os parâmetros a serem estimados, distinguem-se:

- determinação de condição inicial (51);
- determinação de condições de fronteira (2) (4);
- determinação de características do meio, tais como propriedades óticas ou fontes internas (58).

Duas abordagens são comumente empregadas na resolução de problemas inversos, que permitem classificar os métodos de inversão em:

- *implícitos*, nos quais a solução é procurada iterativamente: gera-se uma solução candidata e a partir desta resolve-se o problema direto e comparam-se as intensidades de energia radiante com os dados experimentais; isto possibilita a escolha de uma nova solução candidata e assim prossegue-se sucessivamente até se encontrar uma solução ótima (conforme critério estabelecido); é o caso do método adotado no presente trabalho;
- *explícitos*, nos quais, os dados observados e o conjunto de parâmetros a serem estimados podem ser relacionados por uma aplicação direta inversível; estes métodos se deparam com a dificuldade de se encontrar expressões matemáticas que constituam inversões de leis conhecidas, como a equação de transferência radiativa; assim, frequentemente, recorre-se a simplificações, como por exemplo a lei de Gershun (33), que relaciona irradiâncias com o coeficiente de absorção.

Problemas inversos em Ótica Hidrológica são pouco abordados na literatura e, citando C. D. Mobley (33), esse tipo de problema seria “very much an *unsolved problem*” (grifo de Mobley). A complexidade de se modelar a propagação da luz num meio espalhante, juntam-se outras dificuldades, tais como a sensibilidade a erros nas medidas experimentais. Ou então o conjunto extenso de parâmetros e condições de contorno supostamente conhecidos, que dependem de hipóteses assumidas e simplificações. Mesmo os resultados publicados (58) indicam não haver surgido ainda uma metodologia eficiente.

Este trabalho propõe-se a resolver alguns problemas inversos em Ótica Hidrológica, mais especificamente, relacionados à propagação da luz em águas naturais. Deseja-se estimar ou *reconstruir*, usando o jargão de problemas inversos, fontes internas de bioluminescência e propriedades óticas da água tais como os coeficientes de absorção e de espalhamento, a partir de medidas *in situ* de irradiâncias. Utilizam-se dados *sintéticos*, isto é, gerados por computador, ao invés dos dados experimentais, constituídos pelas irradiâncias em diversas profundidades. Conhece-se a intensidade da luz atmosférica incidente na água.

A metodologia implícita utilizada inclui um algoritmo de inversão proposto por Ramos e Giovannini (44) e Ramos e Campos Velho (45), regularização entrópica (25) e um modelo direto baseado na teoria de *invariant imbedding* (31) (33). Este último resolve a equação de transferência radiativa unidimensional e estacionária para um comprimento de onda determinado, sendo implementado pelo código Hydrolight 3.0 (34). Esta metodologia se mostrou efetiva para alguns dos casos analisados, podendo ser aplicada praticamente sem restrições a problemas inversos relativos a águas naturais.

No Capítulo 2 trata-se do problema direto em Ótica Hidrológica e da teoria de *invariant imbedding* adotada para sua resolução e o Capítulo 3, da metodologia de inversão utilizada. O Capítulo 4 aborda a estimação de fontes de bioluminescência e o Capítulo 5, a estimação dos coeficientes de absorção e espalhamento. No Capítulo 6, busca-se obter algumas conclusões, fazer os comentários finais e propor atividades futuras.

A resolução dos problemas inversos abordados neste trabalho possibilitaria estimar propriedades óticas e fontes internas através de medidas experimentais de irradiâncias *in situ*, dispensando, por exemplo, medições em laboratório de tais propriedades, que seriam mais custosas e demoradas. O domínio dessa metodologia de inversão abriria caminho para estimações *remotas*, por meio de aviões ou satélites, e a partir destas poder-se-iam inferir concentrações de constituintes orgânicos e inorgânicos da água, com benefícios científicos e econômicos.

CAPÍTULO 2

O MODELO DIRETO

2.1 Alguns Conceitos em Ótica Hidrológica

Definem-se, inicialmente, algumas grandezas relacionadas à transferência radiativa e à Ótica Hidrológica. Na radiometria, ramo da ciência que estuda a medição da energia radiante, ou seja, eletromagnética, a grandeza fundamental é a radiância, que mede a energia de um feixe infinitesimal de radiação, num dado ponto, por unidade de tempo, por unidade de área A e por unidade de ângulo sólido Ω (*esferorradiano* - sr). Considera-se que o feixe esteja contido num ângulo sólido infinitesimal, centrado na direção em que aponta, conforme a Figura 2.1, sendo P o ponto de onde o feixe foi emitido ou espalhado. Assim, a radiância (L) depende da posição (\vec{x}), do instante (t) e da direção ($\vec{\xi}$) consideradas. No entanto, normalmente se trabalha com um comprimento de onda específico λ (geralmente expresso em *nanometro* - nm , $1 nm = 10^{-9} m$), e fala-se em radiância *espectral*, considerando-se que o feixe abrange uma faixa infinitesimal de comprimentos de onda, centrada em λ . Define-se a radiância *espectral* por:

$$L(\vec{x}, t, \vec{\xi}, \lambda) \equiv \frac{\text{energia}}{dt dA d\Omega d\lambda} \quad (W m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}). \quad (2.1)$$

O instrumento comum (Figura 2.2) para medição de radiância compõe-se de um tubo coletor, a ser apontado na direção considerada, que tem no fundo um difusor, destinado a tornar o campo de luz mais homogêneo, um filtro para o comprimento de onda escolhido e um detetor, com sua eletrônica associada. A radiância, apesar de sua dependência direcional, **não** é um vetor.

A radiância é uma medida da energia radiante, diferente da *intensidade luminosa*, a qual é dada em *candela* - cd (*SI*, Sistema Internacional), definida como “a intensidade luminosa, numa dada direção, de uma fonte que emite energia radiante monocromática de frequência igual a $540 \times 10^{12} Hz$ e cuja *intensidade radiante* naquela direção seja de $1/683 W$ ” (33). Essa frequência corresponde, no vácuo, a um comprimento de onda de $555 nm$. A candela corresponde dimensionalmente a energia luminosa por unidade de tempo e por unidade de ângulo sólido, ou seja, potência luminosa por unidade de ângulo sólido (dado em sr). O *lumen* - lm foi proposto como unidade de potência luminosa (não reconhecida pelo *SI*) e definido como $1 lm = 1 cd sr$, podendo ser expresso em *watt* através de uma constante de conversão adequada. Finalmente, a *luminância*, dada em $lm m^{-2} sr^{-1}$ no *SI*, ou em cd/m^2 , expressa a densidade de potência luminosa, que corresponde à sensação visual de brilho.

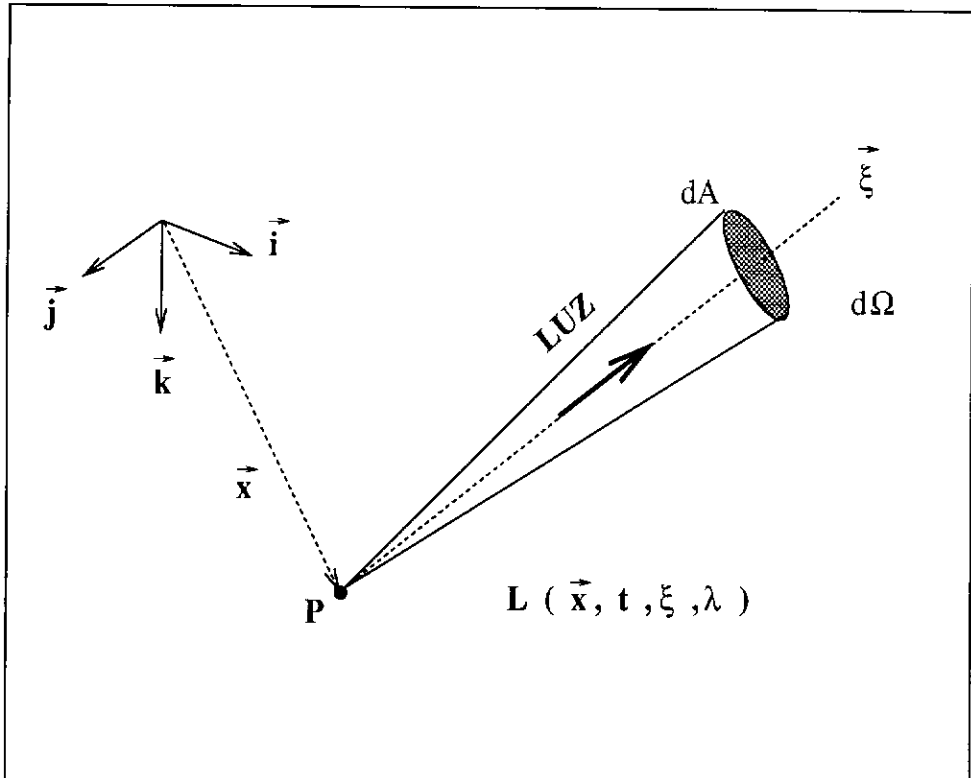


Fig. 2.1 - Feixe de luz infinitesimal utilizado na definição da radiância L .

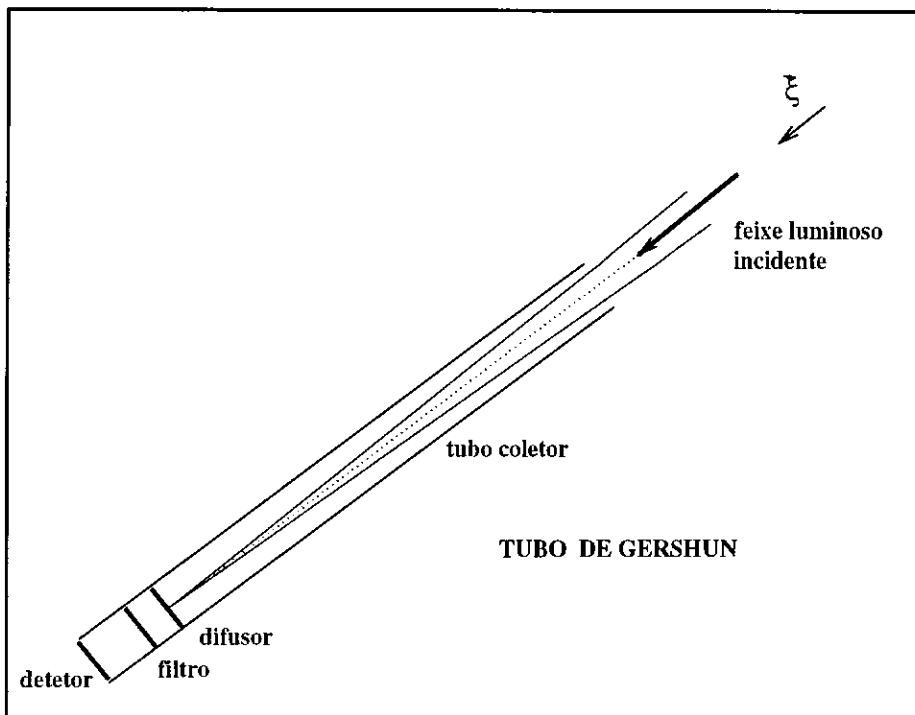


Fig. 2.2 - Instrumento usado na medida da radiância espectral L numa dada direção ξ .

Neste trabalho, trata-se com a intensidade da energia radiante, sendo que, por facilidade de medição ou conveniência, utilizam-se a *irradiâncias*, ao invés da radiância (a irradiância é simplesmente a radiância integrada para uma gama de ângulos sólidos, conforme definido a seguir). O campo luminoso é considerado como sendo independente do tempo t : consideram-se feixes *contínuos* e não pulsos de luz, ou seja, assume-se que o regime seja **estacionário**. Assume-se uma invariância translacional (em x e y) e rotacional (em torno de z). Assim, a dependência espacial (vetor posição \vec{x}) é expressa apenas pela profundidade z (problema **unidimensional**). Por conveniência de notação, a dependência de λ é omitida, embora as grandezas estudadas sejam espectrais.

A irradiância *espectral* é dada em $W\ m^{-2}\ nm^{-1}$ e classifica-se em 4 tipos, onde denota-se o sentido ascendente por u (*upward*) e descendente por d (*downward*):

- irradiância plana ascendente (E_u);
- irradiância plana descendente (E_d);
- irradiância escalar ascendente (E_{0u});
- irradiância escalar descendente (E_{0d});

As irradiâncias planas (E_u e E_d) são medidas através de um sensor plano, colocado horizontalmente e diretamente exposto ao campo luminoso, voltado para cima ou para baixo conforme deseje-se medir E_d ou E_u , respectivamente (Figura 2.3). Pelo fato de ser plano, o sensor receberá feixes incidentes de todas as direções, correspondentes aos ângulos sólidos do hemisfério superior ou inferior, **projetados** na direção da normal ao sensor (vertical). Assim, a partir da projeção das radiâncias na direção da normal, definem-se as irradiâncias planas:

$$E_{u/d}(z) = \int_{\Xi_{u/d}} L(z, \vec{\xi}) |\cos\theta| d\Omega . \quad (2.2)$$

O ângulo sólido infinitesimal (Figura 2.4) é definido em função dos ângulos polar (θ) e azimutal (ϕ) por $d\Omega = \sin\theta\ d\theta\ d\phi$.

A utilização de um sensor esférico (Figura 2.3), voltado para cima/baixo e montado sobre um anteparo horizontal opaco, permite computar as radiâncias dirigidas para baixo/cima sem a atenuação do fator $|\cos\theta|$, o que resulta na irradiância escalar descendente/ascendente:

$$E_{0_{u/d}}(z) = \int_{\Xi_{u/d}} L(z, \vec{\xi}) d\Omega . \quad (2.3)$$

Citam-se a seguir duas outras grandezas relevantes especialmente quando da estimação por *sensoriamento remoto*, isto é, por sensores embarcados

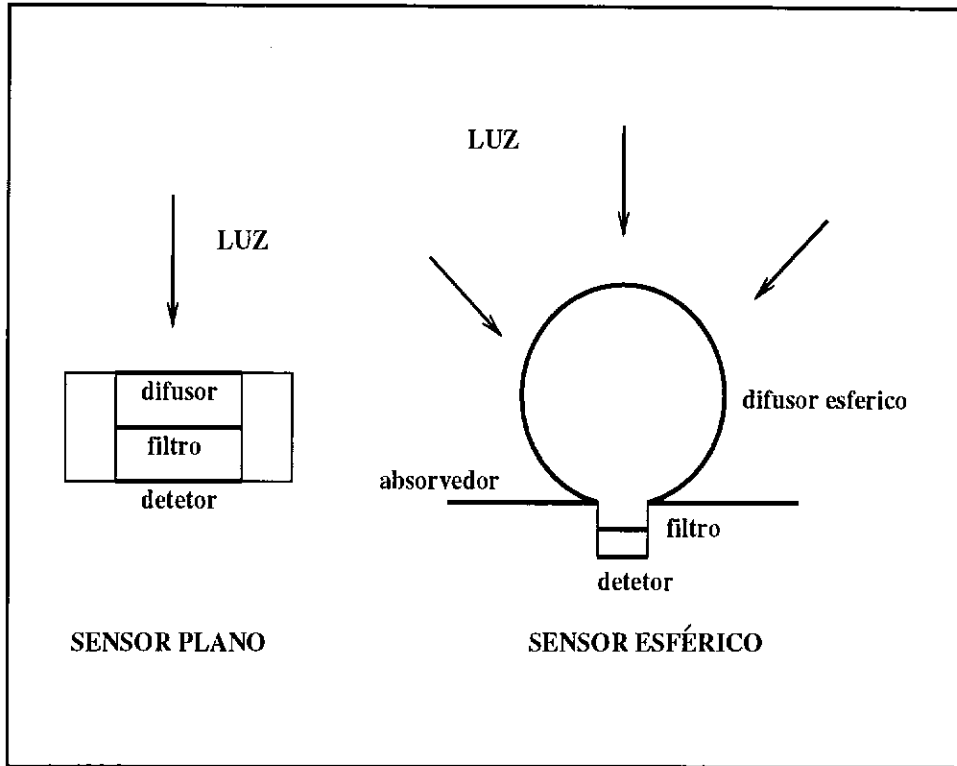


Fig. 2.3 - Instrumentos dispostos de forma a medir as irradiâncias descendentes: sensor plano (E_d) e sensor esférico (E_{0d}).

em aviões ou satélites, de propriedades óticas da água. Define-se a *reflectância espectral de irradiância*, para um dado comprimento de onda λ , para o nível $z = w$ (imediatamente abaixo da superfície, vide Figura 2.4), por:

$$R(z = w) \equiv \frac{E_u(z = w)}{E_d(z = w)}. \quad (2.4)$$

Define-se a *reflectância espectral de sensoriamento remoto*, um dado comprimento de onda λ , para uma direção $\vec{\xi}$ e para o nível $z = a$ (superfície da água) por:

$$R_{rs}(\vec{\xi}) \equiv \frac{L(z = a; \vec{\xi})}{E_d(z = a)} \quad (sr^{-1}). \quad (2.5)$$

Essas grandezas expressam que parcela da luz atmosférica incidente retorna à atmosfera, sendo muito utilizadas em oceanografia ótica.

2.2 Propriedades Óticas Inerentes da Água

Definem-se propriedades óticas inerentes de um meio (*inherent optical properties - IOP's*), no caso a água, como sendo aquelas que dependem exclusivamente do meio e são relevantes do ponto de vista da Ótica Hidrológica. Em oposição, existem as propriedades óticas aparentes de um meio (*apparent optical*

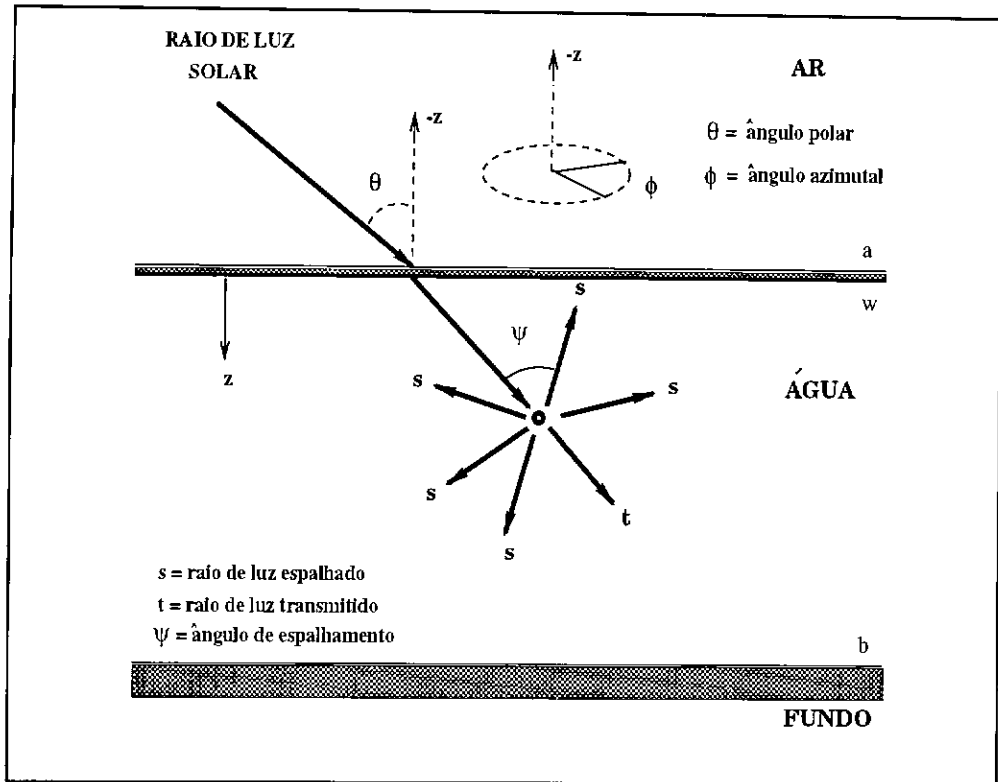


Fig. 2.4 - Modelo esquemático do problema considerado.

properties - AOP's), que dependem do meio e também da estrutura direcional do campo de luz ambiente, embora permitam inferir as propriedades óticas inerentes. IOP's geralmente necessitam ser medidas em laboratório, a partir de uma amostra de água, enquanto que AOP's podem ser medidas *in situ*, provendo informação sobre o comportamento ótico da água de maneira mais imediata. Assim, as IOP's expressam melhor o comportamento ótico da água, mas as AOP's são mais prontamente disponíveis. Como exemplos de AOP's, citam-se as reflectâncias espectrais de irradiância (Equação 2.4) e de sensoriamento remoto (Equação 2.5), definidas na seção anterior. Este trabalho abordará unicamente as IOP's, algumas das quais serão estimadas adiante.

As seguintes definições foram extraídas do livro de C. D. Mobley (33). As IOP's "básicas" são os coeficientes de absorção (a), a função volumétrica de espalhamento ($\hat{\beta}$) e o índice de refração (n). Outras IOP's derivam destas: o coeficiente de espalhamento (b), a função de fase (β), o coeficiente de atenuação do feixe (c) e o albedo de espalhamento simples (ω_0).

A Figura 2.5 ilustra o que ocorre quando um feixe estreito e colimado de luz de comprimento de onda λ com potência espectral radiante $\Phi_i(\lambda)$, cuja unidade no SI é $W\ nm^{-1}$, incide num volume de água ΔV , com área S e espessura Δr . Nesta figura, $\phi = 0$ e o ângulo polar (θ) do feixe espalhado coincide com o ângulo de espalhamento (ψ). Assume-se que não haja espalhamento *inelástico* ou

trans-espectral (por exemplo, espalhamento de Raman), ou seja, que a luz não seja absorvida em λ e “re-emitida” em outro comprimento de onda. Esta é uma hipótese aceitável em águas naturais (33). Parte dessa potência incidente será transmitida ($\Phi_t(\lambda)$), parte será absorvida ($\Phi_a(\lambda)$) e parte espalhada ($\Phi_s(\lambda)$) em todas as direções, sendo ψ o ângulo de espalhamento, representado nesta figura para uma direção particular. Assim, pela conservação da energia, tem-se que:

$$\Phi_i(\lambda) = \Phi_a(\lambda) + \Phi_s(\lambda) + \Phi_t(\lambda) .$$

As grandezas adimensionais *absorptância* ($A(\lambda)$), *espalhância* ($B(\lambda)$) e *transmitância* ($T(\lambda)$) espectrais são definidas, respectivamente, por:

$$A(\lambda) \equiv \Phi_a(\lambda) / \Phi_i(\lambda) ; \quad (2.6)$$

$$B(\lambda) \equiv \Phi_s(\lambda) / \Phi_i(\lambda) ; \quad (2.7)$$

$$T(\lambda) \equiv \Phi_t(\lambda) / \Phi_i(\lambda) ; \quad (2.8)$$

claramente,

$$A(\lambda) + B(\lambda) + T(\lambda) = 1 .$$

Existe também a *absorbância* $D(\lambda)$, ou densidade ótica, grandeza medida por espectrofotômetros e definida por:

$$D(\lambda) = -\log_{10} [1 - A(\lambda)] .$$

A partir do exposto acima, podem-se definir algumas IOP's, como o coeficiente espectral de absorção,

$$a(\lambda) \equiv \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{A(\lambda)}{\Delta r} \quad (m^{-1}) \quad (2.9)$$

o coeficiente espectral de espalhamento,

$$b(\lambda) \equiv \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{B(\lambda)}{\Delta r} \quad (m^{-1}) \quad (2.10)$$

e o coeficiente espectral de atenuação do feixe:

$$c(\lambda) \equiv a(\lambda) + b(\lambda) \quad (m^{-1}) . \quad (2.11)$$

A potência luminosa espalhada tem uma distribuição angular, em função do ângulo de espalhamento ψ e do ângulo azimutal ϕ (não se considera aqui a dependência da **polarização**), ou seja, $B(\lambda) = B(\phi, \psi, \lambda)$. Um feixe de luz espalhado numa direção que forma o ângulo ψ ($0 \leq \psi \leq \pi$) com a direção do feixe incidente, ocupa um ângulo sólido $\Delta\Omega = \sin\psi \, d\psi \, d\phi$, centrado na direção espalhada. Define-se a função volumétrica espectral de espalhamento ($\tilde{\beta}(\psi, \lambda)$) como sendo:

$$\tilde{\beta}(\phi, \psi, \lambda) \equiv \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0} \frac{B(\phi, \psi, \lambda)}{\Delta r \, \Delta\Omega} \quad (m^{-1} \, sr^{-1}) . \quad (2.12)$$

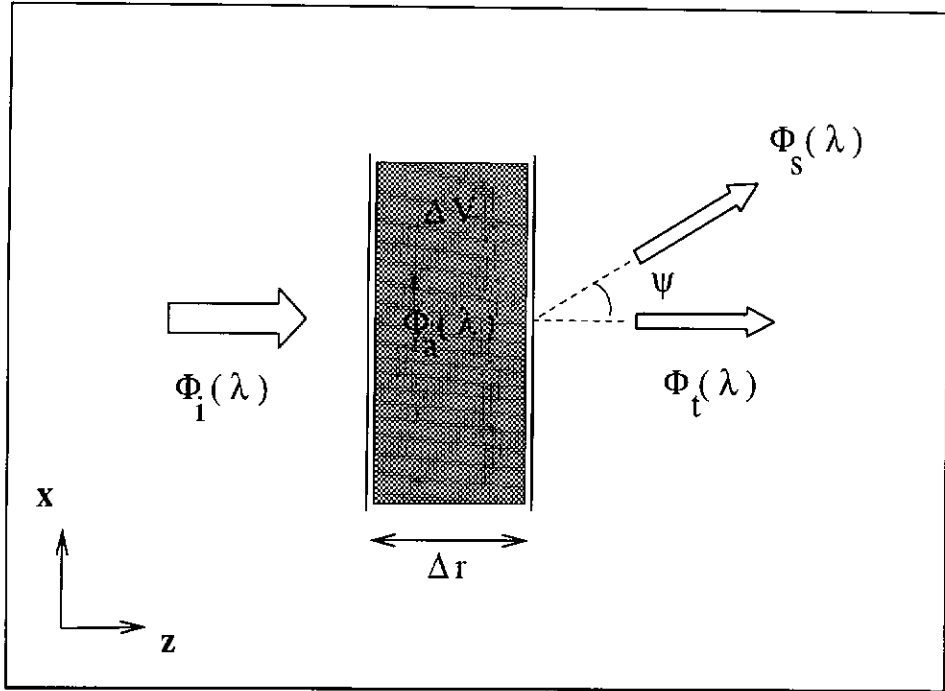


Fig. 2.5 - Geometria utilizada na definição das IOP's (para ângulo azimutal $\phi = 0$).

Esta função expressa a dependência direcional e a intensidade do espalhamento. Se integrada para todas as direções (domínio Ξ), fornece o coeficiente espectral de espalhamento:

$$b(\lambda) = \int_{\Xi} \tilde{\beta}(\phi, \psi, \lambda) d\Omega . \quad (2.13)$$

Pode-se definir a função de fase de espalhamento, ou simplesmente função de fase (β), como sendo:

$$\beta(\psi, \lambda) \equiv \frac{\tilde{\beta}(\phi, \psi, \lambda)}{b(\lambda)} \quad (sr^{-1}) . \quad (2.14)$$

Considerando-se **independência azimutal** (ϕ) em torno da direção incidente (invariância por rotação em torno de z), simplificação usada na literatura, e uma vez que $d\Omega = \sin \psi d\psi d\phi$, pode-se integrar a expressão acima em ϕ :

$$b(\lambda) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \tilde{\beta}(\psi, \lambda) \sin \psi d\psi d\phi = 2\pi \int_0^\pi \tilde{\beta}(\psi, \lambda) \sin \psi d\psi . \quad (2.15)$$

Assim, a função volumétrica espectral de espalhamento ($\tilde{\beta}(\psi, \lambda)$) pode ser expressa como o produto do coeficiente espectral de espalhamento, que fornece a *intensidade* do espalhamento, e da função de fase, que fornece a *distribuição angular*

do mesmo. Substituindo-se esta definição na integral acima, tem-se a condição de normalização para a função de fase:

$$2\pi \int_0^\pi \beta(\psi, \lambda) \sin \psi \, d\psi = 1.$$

O albedo espectral de espalhamento simples ($\omega_0(\lambda)$) é adimensional e indica qual a parcela de atenuação do feixe devida ao espalhamento:

$$\omega_0(\lambda) \equiv \frac{b(\lambda)}{c(\lambda)}. \quad (2.16)$$

Resta o índice de refração (n). A teoria de propagação de ondas eletromagnéticas define um índice complexo de refração (m), que depende do meio considerado. A parte real deste índice complexo, conhecida simplesmente por índice de refração, determina as propriedades espalhantes do meio, enquanto que a parte imaginária está associada à absorção ou emissão. Na água, movimentos moleculares levam a uma variação do índice de refração, sem a qual não haveria espalhamento. O índice de refração da água (n) varia com o comprimento de onda e com a temperatura. Em particular, na faixa espectral de 400 nm a 700 nm e no intervalo de 0° a 30° C, varia de 1.329 a 1.344 para a água doce, e de 1.335 a 1.351 para a água salgada. Nos casos abordados neste trabalho, o índice de refração é assumido constante.

Os constituintes opticamente significativos da água incluem partículas (aparecem, entre parênteses, valores típicos relativos ao tamanho) tais como moléculas de água ($\sim 0.1 \text{ nm}$), moléculas orgânicas ($\sim 1 - 10 \text{ nm}$), vírus ($\sim 20 - 250 \text{ nm}$), bactérias ($\sim 0.2 - 1.0 \text{ }\mu\text{m}$), células de *fitoplancton* ($\sim 1 - 200 \text{ }\mu\text{m}$), além de detritos orgânicos (*substância amarela*, proveniente da decomposição de vegetais) e inorgânicos (areia, óxidos, etc.).

De maneira genérica, pode-se classificar grosseiramente as águas marinhas em aquelas em que há concentrações predominantes de *fitoplancton*, as quais podem ser baixas (águas límpidas) ou altas (águas turvas), e aquelas em que há concentrações predominantes de sedimentos inorgânicos ou matéria orgânica dissolvida (águas turvas, geralmente costeiras ou estuarinas).

A determinação de IOP's em águas naturais tem um papel importante, pois estão associadas a concentrações de constituintes orgânicos ou inorgânicos que são importantes para a biologia, geologia, pesca, etc. Existe uma variedade de modelos bio-óticos que expressam o coeficiente de absorção em função do coeficiente correspondente para a água do mar pura, do comprimento de onda considerado e das concentrações dos constituintes de interesse. O mesmo ocorre para o coeficiente de espalhamento.

A Tabela 2.1 contém valores típicos de IOP's, para diferentes tipos de águas.

TABELA 2.1 - PROPRIEDADES ÓTICAS SELECIONADAS PARA DIFERENTES TIPOS DE ÁGUA, PARA $\lambda = 514 \text{ nm}$

tipo de água	$a \text{ (m}^{-1}\text{)}$	$b \text{ (m}^{-1}\text{)}$	$c \text{ (m}^{-1}\text{)}$	ω_0
água do mar pura	0.0405	0.0025	0.043	0.058
oceano aberto	0.114	0.037	0.151	0.245
mar costeiro	0.179	0.219	0.398	0.550
baía de águas turvas	0.366	1.824	2.190	0.833

FONTE: adaptada de C. D. Mobley (1994), p. 112.

2.3 A Equação de Transferência Radiativa

A equação de transferência radiativa é uma lei de conservação de energia, sendo expressa em radiâncias, no escopo da Ótica Hidrológica, razão pela qual a mesma também é chamada equação de transferência de radiâncias. Os dados de entrada do problema direto, incluem a distribuição espectral de radiâncias na atmosfera, o estado da superfície da água sob efeito de ventos, as condições do fundo, as propriedades óticas da água (IOP's), em particular os coeficientes de absorção e espalhamento, e as fontes de luz submersas, tais como bioluminescência ou fluorescência.

Uma hipótese básica na teoria de transferência radiativa é o *princípio da linearidade* ou interação linear entre a luz e o meio, válido para fótons de baixa energia. Segundo este princípio, a energia radiante incidente provoca no meio uma resposta diretamente proporcional à intensidade radiante associada à essa radiação. Isso se aplica perfeitamente à Ótica Hidrológica abordada neste trabalho. Existe a ótica não-linear, que trata por exemplo da interação de um raio laser muito intenso com um meio.

Conforme citado anteriormente, assume-se que o problema seja estacionário e unidimensional, variando unicamente em profundidade (z), configurando uma geometria **plano-paralela**. Esta geometria implica em supor a água como tendo uma extensão horizontal infinita, sem variações horizontais das IOP's, hipótese aceitável para a maioria das aplicações em Oceanografia. Assim, devido a essa *dependência espacial*, as variáveis e parâmetros da equação de transferência radiativa são expressas em função de z . Conforme também já mencionado, omite-se da notação a dependência com o comprimento de onda (λ), por conveniência.

A equação de transferência radiativa monocromática pode ser expressa como a seguir, onde cada termo tem como unidade $W \text{ m}^{-3} \text{ sr}^{-1} \text{ nm}^{-1}$ (radiância por unidade de comprimento):

$$\mu \frac{\partial L(z, \vec{\xi})}{\partial z} = -c(z)L(z, \vec{\xi}) + \int_{\Xi} L(z, \vec{\xi}') \beta(z, \vec{\xi}' \rightarrow \vec{\xi}) d\vec{\xi}' + s(z, \vec{\xi}) \quad (2.17)$$

onde z é a profundidade (vide Figura 2.4), $L(z, \vec{\xi})$ a radiância para a profundidade z e direção $\vec{\xi}$; $\vec{\xi}' = \vec{\xi}(\theta', \phi')$ e $\vec{\xi} = \vec{\xi}(\theta, \phi)$ são as direções incidente e espalhada para um feixe de luz infinitesimal ($\vec{\xi}, \vec{\xi}' \in \Xi$, domínio das direções), θ sendo o ângulo polar e ϕ o azimutal e $\mu = \cos(\theta)$; $\beta(z, \vec{\xi}' \rightarrow \vec{\xi})$ é a função de fase de espalhamento, nota-se que as direções $\vec{\xi}'$ e $\vec{\xi}$ definem o ângulo de espalhamento (ψ); $s(z, \vec{\xi})$ é o termo fonte e c é o coeficiente de atenuação do feixe.

Este é um problema de *condição de contorno*, onde na fronteira superior $z = z_w$ e inferior $z = z_b$, conhecem-se as radiâncias incidentes:

$$L(z_w, \vec{\xi}) = L_w(\vec{\xi}) \quad \text{para} \quad 0 \leq \mu \leq 1, \quad \forall \phi \quad (2.18)$$

$$L(z_b, \vec{\xi}) = L_b(\vec{\xi}) \quad \text{para} \quad -1 \leq \mu \leq 0, \quad \forall \phi \quad (2.19)$$

mas não as radiâncias emergentes:

$$L(z_w, \vec{\xi}) \quad \text{para} \quad -1 \leq \mu < 0, \quad \forall \phi \quad (2.20)$$

$$L(z_b, \vec{\xi}) \quad \text{para} \quad 0 < \mu \leq 1, \quad \forall \phi \quad (2.21)$$

Escolhe-se uma função de fase de espalhamento conforme a relação entre o diâmetro (D) das partículas espalhantes e o comprimento de onda (λ) considerado. Quando $D \ll \lambda$, tem-se espalhamento isotrópico (ou então espalhamento de Rayleigh), modelados pelas funções de fase de mesmo nome. Para $D \geq \lambda$, tem-se espalhamento de Mie. De maneira geral, a função de fase de espalhamento pode ser modelada por uma série de polinômios de Legendre. Neste trabalho, cujos casos de teste referem-se a águas costeiras, em que as partículas espalhantes (material orgânico, lama, etc.) possuem $D \gg \lambda$, aproxima-se a função de fase real por meio de uma simplificação dessa série: a função de Henyey-Greenstein de termo único (OTHG - *One Term Henyey-Greenstein*), expressa por (24):

$$\beta(z, \psi) = \frac{1}{4\pi} (1 - g^2) [1 + g^2 - 2g \cos(\psi)]^{-3/2} \quad (2.22)$$

onde ψ é o ângulo de espalhamento (formado pelas direções $\vec{\xi}'$ e $\vec{\xi}$) e g é o cosseno médio de ψ . Adota-se aqui $g = 0.90$, valor que expressa $D \gg \lambda$, condição na qual a maior parte da luz é espalhada para a frente (hipoteticamente, $g = 1$ corresponderia a ausência de espalhamento e toda a luz não absorvida seria transmitida para a frente, na direção do raio luminoso, enquanto que $g = 0$ corresponderia a um espalhamento isotrópico). Poder-se-ia utilizar uma aproximação mais conveniente no lugar da função OTHG, pela simples substituição da rotina específica no modelo direto.

Introduz-se aqui uma grandeza adimensional muito importante, a *profundidade ótica* ζ (ou *espessura ótica*), que também depende do comprimento de onda λ , definida, para a presente geometria plano-paralela, por:

$$d\zeta \equiv c(z) dz . \quad (2.23)$$

ζ permite interpretar o quanto uma camada de água é *oticamente* espessa, ou seja, o quanto é transparente (ou opaca). Existem outras definições equivalentes, tal como:

$$d\zeta \equiv k(z)\rho(z)dz, \quad (2.24)$$

sendo $k(z)$ a secção de extinção do meio (que inclui perdas por absorção e espalhamento, dada em m^2) e $\rho(z)$, sua densidade de partículas em m^{-3} . O *caminho livre médio* é dado por $\ell(z) = 1/[k(z)\rho(z)]$ (m), de forma que pode-se escrever: $d\zeta = dz/\ell(z)$. Em outra formulação, $k(z)$ representa o coeficiente de extinção de massa do meio (m^2/kg) e $\rho(z)$, sua densidade (kg/m^3). Tem-se também a *profundidade ótica de transporte*, $d\zeta^* = d\zeta(1-g)$, onde g é o cosseno médio do ângulo de espalhamento. Nos casos abordados neste trabalho, para a profundidade máxima de $30m$, tem-se $\zeta \approx 40$ e, como $g = 0.90$, $\zeta^* = 4$. Como se considera o meio transparente quando $\zeta^* \ll 1$ ou difuso quando $\zeta^* \gg 1$, pode-se dizer que esses casos referem-se a um meio translúcido (24).

A mesma equação de transferência radiativa (Equação 2.17), quando expressa em termos da *profundidade ótica* ζ e do *albedo de espalhamento simples* ω_0 , toma a forma abaixo, na qual cada termo tem a unidade da radiância, ou seja, $W m^{-2} sr^{-1} nm^{-1}$:

$$\mu \frac{\partial L(\zeta, \vec{\xi})}{\partial \zeta} = -L(\zeta, \vec{\xi}) + \omega_0(\zeta) \int_{\Xi} L(\zeta, \vec{\xi}') \beta(\zeta, \vec{\xi}' \rightarrow \vec{\xi}) d\vec{\xi}' + S(\zeta, \vec{\xi}) \quad (2.25)$$

onde o termo fonte é agora dado por $S(\zeta, \vec{\xi}) = s(\zeta, \vec{\xi})/c(z)$ e valem as mesmas condições de contorno expressas nas Equações 2.18 e 2.19.

2.4 Metodologias de Resolução

A equação de transferência radiativa na sua forma geral é de difícil solução, tendo-se obtido soluções analíticas somente em pouquíssimos casos, graças a hipóteses simplificadoras. Dentre estes métodos analíticos podem-se citar a técnica de Wiener-Hopf (66) (36) e a técnica de expansão em auto-funções singulares devida a K. M. Case (9) (10).

Em casos mais gerais são empregadas técnicas numéricas, tais como os conhecidos métodos de Monte Carlo, bem descritos na literatura, com vários códigos disponíveis (17) (67); os métodos de ordenadas discretas (S_n) (11) (6) (28) e suas variantes, como o método $LT S_n$ (1) (4) (3) (63) (64) (65) (47) (48) (70); métodos de harmônicos esféricos (17) (6) (7) (19); e os métodos de *invariant imbedding* (10), (40) (41) (33).

No presente trabalho, adota-se um método de *invariant imbedding*, conforme proposto por C. D. Mobley (33) (34) pois, um trabalho recente (32), que compara os métodos numéricos supra-citados, este método mostrou-se competitivo. Sua implementação requer uma discretização das variáveis angulares da equação de transferência radiativa que serve de ponto de partida para a aplicação da metodologia de *invariant imbedding*.

2.4.1 Discretização Polar e Azimutal

A Equação 2.17 é discretizada por meio de uma divisão conveniente do espaço em setores angulares denominados *quads*. Divide-se o domínio num número finito de ângulos azimutais (n) e polares (m), de forma a obedecer a um critério conveniente, por exemplo, *quads* com $\Delta\theta$ constante, ou então, com ângulo sólido $\Delta\Omega = \Delta\mu \Delta\phi = \sin\theta \Delta\theta \Delta\phi$ constante. Assim, a radiância $L(\zeta; \mu, \phi)$, uma função contínua da direção considerada, é substituída por uma função discreta $L(\zeta; \mu_i, \phi_j)$, que assume um valor médio para cada *quad*, centrado em $[\theta_i, \phi_j]$, definida como a seguir, onde Ξ_{ij} representa o domínio de θ e de ϕ dentro do *quad* (centrado em $[\theta_i, \phi_j]$):

$$L(\zeta; \mu_i, \phi_j) = \frac{1}{\Xi_{ij}} \int_{\mu_i} \int_{\phi_j} L(\zeta; \mu, \phi) d\mu d\phi. \quad (2.26)$$

Devido a esta discretização, a equação de transferência radiativa monocromática, Equação 2.25, é então reescrita como:

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{dL(\zeta; \mu_i, \phi_j)}{d\zeta} &= -L(\zeta; \mu_i, \phi_j) + \omega_0(\zeta) \sum_r \sum_s L(\zeta; \mu_r, \phi_s) \beta(\zeta; \mu_r, \phi_s \rightarrow \mu_i, \phi_j) \\ &+ S(\zeta, \mu_i, \phi_j). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Neste trabalho adotaram-se sempre os valores 20, para discretização do ângulo polar ($0 \leq \theta \leq \pi$), e 24 para o azimutal ($0 \leq \theta \leq 2\pi$) e escolheram-se sempre *quads* com $\Delta\theta$ constante.

2.4.2 Decomposição “Espectral”

A radiância pode ser decomposta espectralmente por meio de sua representação polinomial de Fourier. Na notação adotada, radiâncias dirigidas para baixo recebem o sinal + e as dirigidas para cima, o sinal -.

$$L^\pm(\zeta; \mu_i, \phi_j) = \sum_{l=0}^n [\hat{L}_1^\pm(\zeta; \mu_i, l) \cos(l\phi_j) + \hat{L}_2^\pm(\zeta; \mu_i, l) \sin(l\phi_j)]. \quad (2.28)$$

Assim, a radiância pode ser expressa por dois conjuntos de vetores ($p = 1$ para a amplitude espectral cosenoidal e $p = 2$ para a senoidal). Usa-se o símbolo $\hat{}$ para enfatizar que se tratam de amplitudes espectrais. Para cada l , correspondente a um ângulo azimutal discreto (n valores possíveis) estão associados pares de vetores ($p = 1$ e $p = 2$) de dimensão m , em que cada componente corresponde a um ângulo polar discreto ($-1 \leq \mu_m \leq 1$), conforme abaixo:

$$\hat{L}_p^\mp(\zeta, l) = [\hat{L}_p^\mp(\zeta; \mu_1, l) \hat{L}_p^\mp(\zeta; \mu_2, l) \hat{L}_p^\mp(\zeta; \mu_3, l) \cdots \hat{L}_p^\mp(\zeta; \mu_m, l)]. \quad (2.29)$$

Reescrevendo-se a equação de transferência radiativa (Equação 2.27) separadamente para $p = 1$ e $p = 2$ e reagrupando-se os termos, podem-se identificar

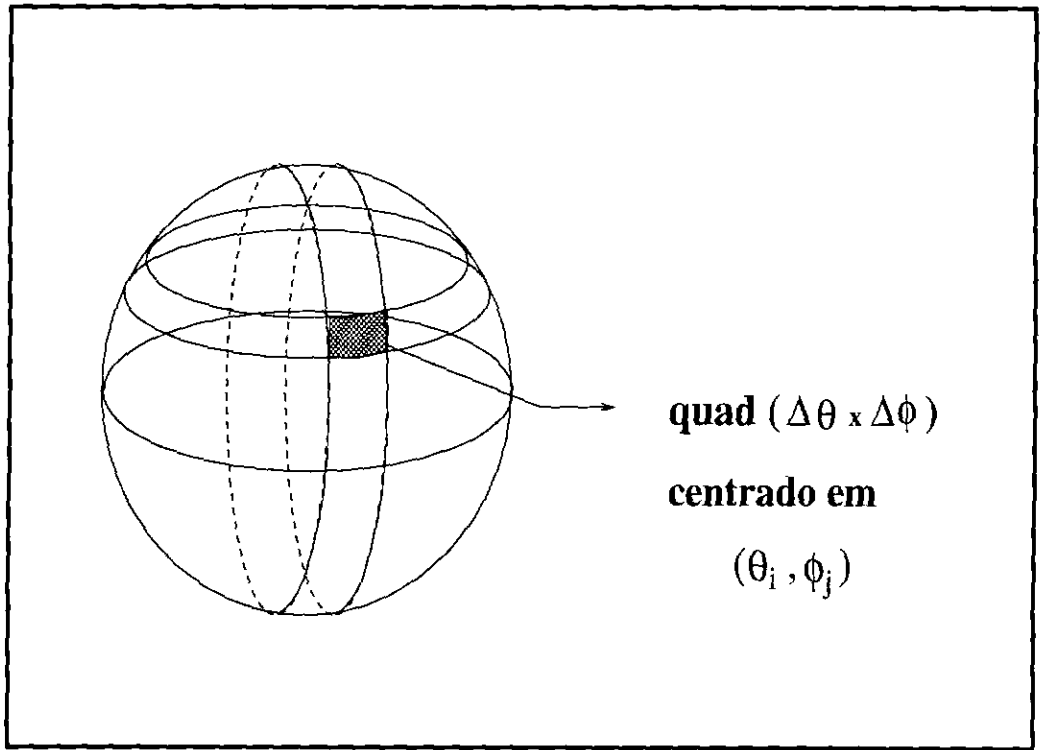


Fig. 2.6 - Discretização polar e azimutal em quads.

operadores específicos como sendo *reflectância espectral local* ($\hat{\rho}$) e a *transmitância espectral local* ($\hat{\tau}$), que são matrizes de dimensão $m \times m$, conforme mostrado na Equação 2.31. Estes operadores expressam como a luz interage *localmente* com uma camada infinitesimal de água e embutem o albedo de espalhamento simples e a função de fase de espalhamento da água, como mostrado em (33), constituindo também IOP's da água. Tem-se assim as chamadas *equações de interação local* para as amplitudes espectrais das radiâncias, que são dois conjuntos de equações, para os $l = 0, 1, 2, \dots, n$ modos azimutais, mostrados a seguir, para $p = 1$ ou $p = 2$.

$$\mp \frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{L}}_p^\mp(\zeta, l) = \hat{\mathbf{L}}_p^\mp(\zeta, l) \hat{\boldsymbol{\tau}}(\zeta, l) + \hat{\mathbf{L}}_p^\pm(\zeta, l) \hat{\boldsymbol{\rho}}(\zeta, l) + \hat{\mathbf{S}}_p^\mp(\zeta, l). \quad (2.30)$$

Estes conjuntos de equações para os diferentes l modos são **independentes** (desacoplamento azimutal) e isto permite dividir um sistema de grau alto em n sistemas de grau menor. Agrupando as radiâncias dirigidas para cima/baixo na forma de matrizes de duas linhas $p = 1$ e $p = 2$), ao invés de vetores, obtém-se uma forma ainda mais compacta para as equações de interação local:

$$\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{L}}_p(\zeta, l) = \hat{\mathbf{L}}_p(\zeta, l) \hat{\mathbf{K}}(\zeta, l) + \hat{\mathbf{S}}_p(\zeta, l). \quad (2.31)$$

onde $\hat{\mathbf{K}}$ é a *matriz espectral de transferência local*, anti-simétrica por blocos, de dimensão $2m \times 2m$, que é em si uma IOP, sendo independente de p :

$$\hat{\mathbf{K}}(\zeta, l) \equiv \begin{bmatrix} -\hat{\boldsymbol{\tau}}(\zeta, l) & \hat{\boldsymbol{\rho}}(\zeta, l) \\ -\hat{\boldsymbol{\rho}}(\zeta, l) & \hat{\boldsymbol{\tau}}(\zeta, l) \end{bmatrix}. \quad (2.32)$$

sendo $\hat{\mathbf{L}}_p = [\hat{\mathbf{L}}_p^- \ \hat{\mathbf{L}}_p^+]$.

A solução fundamental ($\hat{\mathbf{M}}$) para as amplitudes espectrais, relativa às equações de interação local (Equação 2.31), sem fontes internas, deve satisfazer a seguinte equação matricial diferencial para cada modo azimutal l (40) (41):

$$\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{M}}(w, \zeta, l) = \hat{\mathbf{M}}(w, \zeta, l) \hat{\mathbf{K}}(\zeta, l) \quad (2.33)$$

sujeita às condições iniciais:

$$\hat{\mathbf{M}}(w, w; l) = \mathbf{I}_{2m \times 2m} \quad (2.34)$$

onde m é a dimensão da discretização polar.

Esta solução fundamental mapeia as amplitudes espectrais das radiações de um nível (nível w , na superfície) para outro (nível genérico ζ). O termo correspondente às fontes internas, ou seja, submersas, pode ser incluído como sendo a convolução das fontes internas e de $\hat{\mathbf{M}}$ (42):

$$\hat{\mathbf{L}}_p(\zeta; l) = \hat{\mathbf{L}}_p(w; l) \hat{\mathbf{M}}(w, \zeta; l) + \int_w^\zeta \hat{\mathbf{S}}_p(\zeta'; l) \hat{\mathbf{M}}(\zeta', \zeta; l) d\zeta' . \quad (2.35)$$

Na maioria dos métodos para resolução da equação de transferência radiativa, parte-se da integração da Equação 2.33, sujeita à Equação 2.34 e existem diversos enfoques possíveis. Por exemplo, o termo $\hat{\mathbf{M}}$ poderia ser obtido por meio do enfoque de matrizes dinâmicas ou não-modais, como sugerido em (12) e (8).

2.5 Teoria de Inserção Invariante (*Invariant Imbedding*)

Adota-se, para o problema direto, um método de *invariant imbedding*. Este tipo de método permite gerar, a partir da equação linear íntegro-diferencial de transferência radiativa, um sistema de equações diferenciais ordinárias não-lineares. Conforme será exposto no Capítulo 3, o procedimento iterativo para resolução de problemas inversos, adotado neste trabalho, requer a resolução sucessiva do problema direto, geralmente centenas de vezes, fazendo com que seja altamente conveniente a adoção de uma metodologia eficiente, em termos de tempo de processamento.

2.5.1 Formulação de Inserção Invariante

Os métodos de *invariant imbedding*, ou “inserção invariante”, surgiram nos anos 40, com o trabalho do astrofísico Ambarzumian e foram posteriormente aplicados à Ótica Hidrológica por Preisendorfer (40) (41) e Preisendorfer e Mobley (42) (33). O problema que deu origem à teoria de inserção invariante era relativo à determinação da reflectância de uma atmosfera estelar infinitamente profunda.

Para aplicação dessa teoria, assume-se que seja válido um princípio segundo o qual a interação entre a luz e uma camada finita do meio possa ser expressa

por operadores lineares, que mapeiam as radiâncias de um nível para outro. Assim, através da inserção invariante são computados esses operadores de *transporte*, ou seja, transmitâncias e reflectâncias globais de uma dada camada de água. Conhecidos esses operadores, as radiâncias emergentes, incógnitas, podem ser obtidas facilmente a partir das radiâncias incidentes.

Um outro aspecto interessante é que a resolução da equação de transferência radiativa constitui um *problema linear de condição de contorno*, de difícil solução, porque na fronteira que delimita a camada de água, constituída pelo nível da superfície (w) e por um nível genérico (ζ), existem radiâncias conhecidas entrando e radiâncias resultantes, desconhecidas, saindo. Tem-se assim metade das radiâncias dadas e metade incógnitas na fronteira: conhecem-se as radiâncias para baixo em w e as radiâncias para cima em ζ mas não as radiâncias para cima em w nem as radiâncias para baixo em ζ , conforme as Equações 2.18 e 2.19 (considerando-se aqui o nível ζ , ao invés de z_b).

A teoria de inserção invariante possibilita transformar o problema de condição de contorno (linear) num *problema não-linear de valor inicial*, o que permite a utilização de toda uma metodologia já estabelecida, incluindo códigos numéricos robustos amplamente testados. Uma característica importante dessa teoria é seu enfoque intuitivamente físico, limitando a parte numérica, praticamente, à resolução de sistemas de equações diferenciais ordinárias. Uma outra vantagem da inserção invariante é que sua metodologia de resolução prescinde da expansão da função de fase, por exemplo em polinômios de Legendre, à diferença de outros métodos citados. Expõe-se a seguir a formulação de inserção invariante, descrevendo-se nesta seção as equações espectrais de interação global, na Seção 2.5.2, as equações de Riccati, e finalmente, na Seção 2.5.3, as regras de inserção invariante.

O rearranjo da Equação 2.35, contendo \hat{M} , leva às *equações espectrais de interação global*, que dizem respeito a uma camada *finita* de água, como mostrado abaixo (os termos \hat{M} foram reescritos como novas matrizes), onde os \hat{T} 's são as chamadas matrizes espectrais de transmitância padrão e os \hat{R} 's as matrizes espectrais de reflectância padrão, que determinam como a luz interage (transmissão, reflexão) com a camada de água. O primeiro conjunto de equações refere-se a uma camada de água entre a superfície (w) e o nível ζ :

$$\begin{bmatrix} \hat{L}_p^-(w; l) \\ \hat{L}_p^+(\zeta; l) \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} \hat{L}_p^-(\zeta; l) \\ \hat{L}_p^+(w; l) \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \hat{T}(\zeta, w; l) & \hat{R}(\zeta, w; l) \\ \hat{R}(w, \zeta; l) & \hat{T}(w, \zeta; l) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{S}_p^-(\zeta, w; l) \\ \hat{S}_p^+(w, \zeta; l) \end{bmatrix}^T \quad (2.36)$$

onde a matriz fonte no segundo membro é a convolução da fonte interna com a solução fundamental, anteriormente mencionada. Nota-se que as amplitudes espectrais de radiâncias *incidentes*, $\hat{L}_p^-(\zeta; l)$ e $\hat{L}_p^+(w; l)$, são conhecidas, enquanto que as *emergentes*, $\hat{L}_p^-(w; l)$ e $\hat{L}_p^+(\zeta; l)$, são incógnitas.

Um segundo conjunto de equações pode ser encontrado para uma camada de água entre o nível ζ e o fundo (b):

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{L}}_p^-(\zeta; l) \\ \hat{\mathbf{L}}_p^+(b; l) \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{L}}_p^-(b; l) \\ \hat{\mathbf{L}}_p^+(\zeta; l) \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{T}}(b, \zeta; l) & \hat{\mathbf{R}}(b, \zeta; l) \\ \hat{\mathbf{R}}(\zeta, b; l) & \hat{\mathbf{T}}(\zeta, b; l) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{S}}_p^-(b, \zeta; l) \\ \hat{\mathbf{S}}_p^+(\zeta, b; l) \end{bmatrix}^T \quad (2.37)$$

Analogamente ao primeiro conjunto, as amplitudes espectrais de radiâncias *incidentes*, $\hat{\mathbf{L}}_p^-(b; l)$ e $\hat{\mathbf{L}}_p^+(\zeta; l)$, são conhecidas, enquanto que as *emergentes*, $\hat{\mathbf{L}}_p^-(\zeta; l)$ e $\hat{\mathbf{L}}_p^+(b; l)$, são incógnitas.

Assim, em ambos os conjuntos, o cálculo das radiâncias emergentes, incógnitas, requer que os operadores espectrais padrão ($\hat{\mathbf{T}}$'s e $\hat{\mathbf{R}}$'s) sejam conhecidos.

2.5.2 Equações de Riccati

Ao invés de integrar as equações de interação local (Equações 2.31) para encontrar $\hat{\mathbf{M}}$, pode-se chegar à solução deduzindo as *equações diferenciais de Riccati*, conforme abaixo, que permitem calcular os operadores padrão $\hat{\mathbf{T}}$'s e $\hat{\mathbf{R}}$'s dos conjuntos acima de equações. Conhecidos estes operadores, as amplitudes espectrais $\hat{\mathbf{L}}$ resultam de uma simples multiplicação de matrizes e, a partir destas, acham-se as radiâncias desejadas.

As equações diferenciais de Riccati são obtidas da seguinte forma:

- 1) diferenciam-se as equações de interação global, obtendo-se um novo conjunto de equações;
- 2) por meio das equações de interação local, substituem-se as derivadas em ζ das amplitudes espectrais de radiâncias, ou seja, derivadas do tipo $d\hat{\mathbf{L}}/d\zeta$;
- 3) agrupam-se os termos de forma que as $\hat{\mathbf{L}}$'s apareçam como coeficientes e os segundos membros das equações sejam iguais a 0, de forma similar ao mostrado abaixo:

$$\hat{\mathbf{L}}^+ \{ \dots \dots \} + \hat{\mathbf{L}}^- \{ \dots \dots \} = 0$$

- 4) assumindo-se que cada equação deva ser identicamente nula para $\hat{\mathbf{L}}$'s arbitrárias, impõe-se que os termos entre chaves nas novas equações, que tem por coeficiente obrigatoriamente uma das $\hat{\mathbf{L}}$'s, sejam também nulos, dando origem assim às equações de Riccati;

Obtém-se um primeiro conjunto de 6 equações de Riccati para a camada entre a superfície e o nível ζ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{R}}(\zeta, w; l) &= \hat{\mathbf{R}}(\zeta, w; l) [\hat{\tau}(\zeta; l) + \hat{\rho}(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, w; l)] \\ &+ \hat{\rho}(\zeta; l) + \hat{\tau}(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, w; l) \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{T}}(w, \zeta; l) = \hat{\mathbf{T}}(w, \zeta; l) \left[\hat{\tau}(\zeta; l) + \hat{\rho}(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, w; l) \right] \quad (2.39)$$

$$\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{T}}(\zeta, w; l) = \left[\hat{\tau}(\zeta; l) + \hat{\mathbf{R}}(\zeta, w; l) \hat{\rho}(\zeta; l) \right] \hat{\mathbf{T}}(\zeta, w; l) \quad (2.40)$$

$$\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{R}}(w, \zeta; l) = \hat{\mathbf{T}}(w, \zeta; l) \hat{\rho}(\zeta; l) \hat{\mathbf{T}}(\zeta, w; l) \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{S}}_p^+(w, \zeta; l) &= \hat{\mathbf{S}}_p^+(w, \zeta; l) \left[\hat{\tau}(\zeta; l) + \hat{\rho}(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, w; l) \right] \\ &+ \hat{\mathbf{S}}_p^+(\zeta; l) + \hat{\mathbf{S}}_p^-(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, w; l) \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{S}}_p^-(\zeta, w; l) = \left[\hat{\mathbf{S}}_p^-(\zeta; l) + \hat{\mathbf{S}}_p^+(w, \zeta; l) \hat{\rho}(\zeta; l) \right] \hat{\mathbf{T}}(\zeta, w; l) \quad (2.43)$$

E um segundo conjunto de 6 equações de Riccati para a camada de água entre o nível ζ e o fundo (b):

$$\begin{aligned} -\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{R}}(\zeta, b; l) &= \hat{\mathbf{R}}(\zeta, b; l) \left[\hat{\tau}(\zeta; l) + \hat{\rho}(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, b; l) \right] \\ &+ \hat{\rho}(\zeta; l) + \hat{\tau}(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, b; l) \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$-\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{T}}(b, \zeta; l) = \hat{\mathbf{T}}(b, \zeta; l) \left[\hat{\tau}(\zeta; l) + \hat{\rho}(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, b; l) \right] \quad (2.45)$$

$$-\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{T}}(\zeta, b; l) = \left[\hat{\tau}(\zeta; l) + \hat{\mathbf{R}}(\zeta, b; l) \hat{\rho}(\zeta; l) \right] \hat{\mathbf{T}}(\zeta, b; l) \quad (2.46)$$

$$-\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{R}}(b, \zeta; l) = \hat{\mathbf{T}}(b, \zeta; l) \hat{\rho}(\zeta; l) \hat{\mathbf{T}}(\zeta, b; l) \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} -\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{S}}_p^-(b, \zeta; l) &= \hat{\mathbf{S}}_p^-(b, \zeta; l) \left[\hat{\tau}(\zeta; l) + \hat{\rho}(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, b; l) \right] \\ &+ \hat{\mathbf{S}}_p^-(\zeta; l) + \hat{\mathbf{S}}_p^+(\zeta; l) \hat{\mathbf{R}}(\zeta, b; l) \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$-\frac{d}{d\zeta} \hat{\mathbf{S}}_p^+(\zeta, b; l) = \left[\hat{\mathbf{S}}_p^+(\zeta; l) + \hat{\mathbf{S}}_p^-(b, \zeta; l) \hat{\rho}(\zeta; l) \right] \hat{\mathbf{T}}(\zeta, b; l) \quad (2.49)$$

A integração dessas equações para uma camada finita de água **desprovida de condições de contorno** fornece os operadores procurados a partir das transmitâncias $\hat{\tau}$ e reflectâncias $\hat{\rho}$ previamente calculadas. Ao invés de resolver o problema diretamente, a metodologia de inserção invariante permite “construir” o corpo de água pela integração das equações de Riccati, inserindo camadas adjacentes de água.

O primeiro conjunto de equações, Equações 2.38 - 2.43 é integrado de **cima para baixo**, a partir do nível w em direção aos níveis ζ_k para os quais desejar-se a solução, enquanto que o segundo conjunto, Equações 2.44 - 2.49 é integrado de

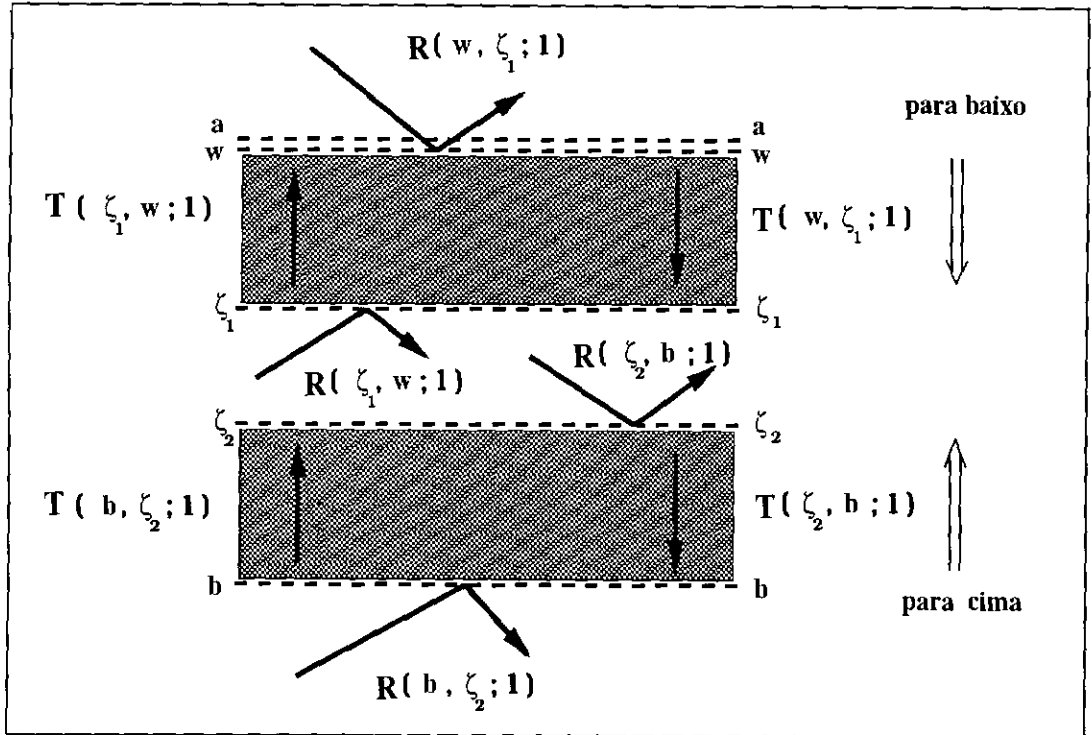


Fig. 2.7 - Operadores procurados e domínio de integração para as equações de Riccati.

baixo para cima, a partir do fundo b , em direção aos níveis ζ_k . Essas integrações fornecem, para cada nível ζ_k , os correspondentes operadores que embutem as propriedades da camada de água entre o nível ζ_k e w e entre ζ_k e b , conforme mostrado na Figura 2.7. As condições do **fundo** são incorporadas quando da integração da Equação 2.44 para se achar $\hat{R}(\zeta, b; l)$, atribuindo-se em $\zeta = b$ o valor adequado, de acordo com as características óticas do fundo considerado (comumente usa-se o fundo Lambertiano, que reflete a luz difusamente).

Segundo a notação adotada, para um dado modo azimutal l , na camada de água entre o nível imediatamente abaixo da superfície (w) e um nível ζ_1 , $\hat{T}(\zeta_1, w; l)$ representa como a luz é transmitida para cima e $\hat{T}(w, \zeta_1; l)$, para baixo. $\hat{R}(w, \zeta_1; l)$ representa como a luz que incide de cima é refletida pela camada e $\hat{R}(\zeta_1, w; l)$, o mesmo para a luz que incide de baixo. Analogamente, na camada de água entre o nível ζ_2 e o nível imediatamente acima do fundo (b), $\hat{T}(b, \zeta_2; l)$ está associado à transmissão da luz para cima, $\hat{T}(\zeta_2, b; l)$, à transmissão para baixo, enquanto que $\hat{R}(b, \zeta_2; l)$ e $\hat{R}(\zeta_2, b; l)$ mostram como a luz é refletida, incidindo de baixo e de cima, respectivamente. A figura esquematiza dois níveis diferentes (ζ_1 e ζ_2), para maior clareza, mas para cada nível ζ considerado, as integrações são feitas de w a ζ (para baixo) e de b a ζ (para cima) e, obviamente, $\zeta = \zeta_1 = \zeta_2$. Note-se que, uma camada "sem espessura", transmitiria tudo e não refletiria nada. Assim, poder-se-ia escrever que $\hat{T}(w, w; l) = 1$ e $\hat{R}(w, w; l) = 0$.

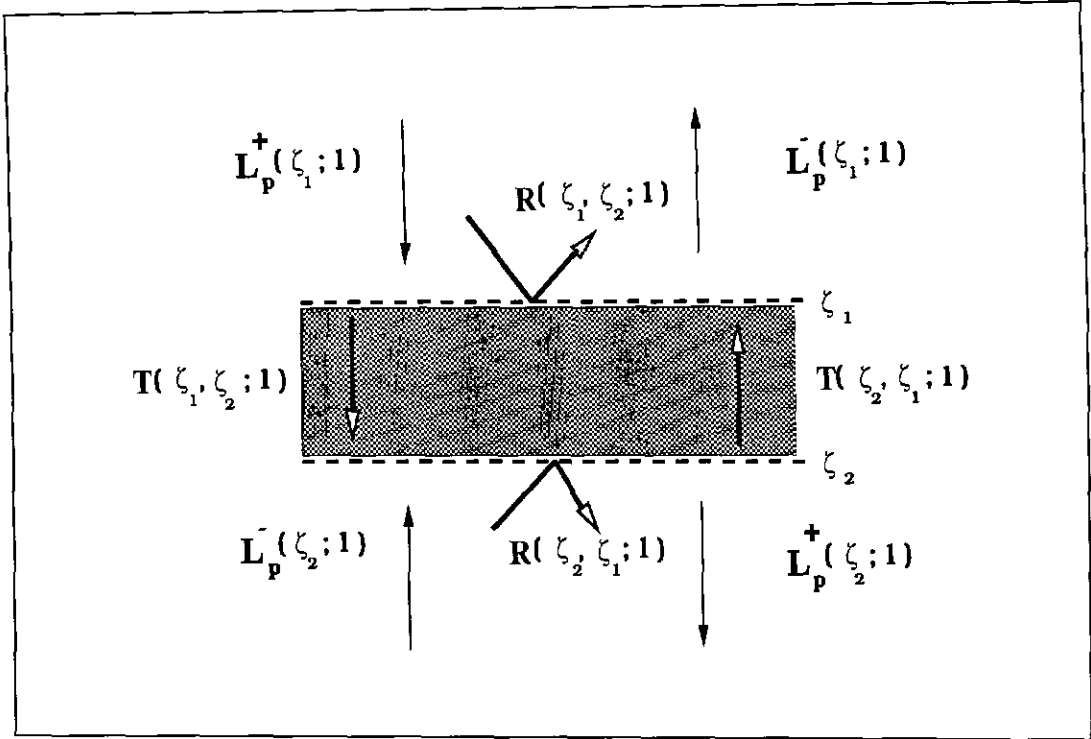


Fig. 2.8 - Operadores padrão \hat{R} e \hat{T} e radiâncias incidentes e emergentes \hat{L} para camada genérica de água desprovida de condições de contorno.

2.5.3 Regras de Inserção Invariante

Considerando-se uma camada de água finita sem fontes internas, entre os níveis ζ_1 e ζ_2 , o princípio da interação linear permite relacionar as amplitudes de radiância incidentes, $\hat{L}_p^+(\zeta_1; l)$ e $\hat{L}_p^-(\zeta_2; l)$, e as emergentes $\hat{L}_p^+(\zeta_2; l)$ e $\hat{L}_p^-(\zeta_1; l)$, por meio dos operadores padrão de reflectância \hat{R} e transmitância \hat{T} , provendo um balanço de energia para a camada considerada (Figura 2.8), para o modo azimutal l considerado, como mostrado abaixo:

$$\hat{L}_p^+(\zeta_2; l) = \hat{L}_p^+(\zeta_1; l) \hat{T}(\zeta_1, \zeta_2; l) + \hat{L}_p^-(\zeta_2; l) \hat{R}(\zeta_2, \zeta_1; l) \quad (2.50)$$

$$\hat{L}_p^-(\zeta_1; l) = \hat{L}_p^-(\zeta_2; l) \hat{T}(\zeta_2, \zeta_1; l) + \hat{L}_p^+(\zeta_1; l) \hat{R}(\zeta_1, \zeta_2; l) \quad (2.51)$$

onde os \hat{T} 's expressam como a luz incidente para cima/baixo é transmitida através da camada e os \hat{R} 's, como a luz incidente para cima/baixo é refletida pela mesma.

Regras de inserção invariante permitem relacionar radiâncias incidentes e emergentes para uma camada finita, desprovida de condições de contorno, do meio considerado, através de operadores "compostos", os quais tem 4 índices. Esses operadores incorporam as condições de contorno da camada considerada relativas à presença de uma camadas adjacente. O último índice refere-se ainda ao modo

azimutal l considerado. Os dois primeiros índices referem-se sempre a níveis que delimitam a camada considerada, sendo que o primeiro nível é o de “entrada” da luz. Nos operadores de transmitância, o segundo índice refere-se ao nível de “saída” da luz, enquanto que nos operadores de reflectância, o nível de “entrada” coincide com o de “saída”. O segundo e o terceiro índices referem-se sempre aos níveis que delimitam a camada adjacente àquela considerada, *oposta* ao nível de “entrada”.

Expõe-se a seguir as regras de inserção invariante para uma camada de água entre ζ_k e a superfície (w) e outra entre ζ_k e o fundo (b). Há também termos “compostos” relativos às fontes internas, que levam em conta a luz emitida por estas na camada considerada dada a presença da camada adjacente:

$$\hat{L}_p^+(\zeta_k; l) = \hat{L}_p^-(b; l) \hat{R}_p(b, \zeta_k, w; l) + \hat{L}_p^+(w; l) \hat{T}_p(w, \zeta_k, b; l) + \hat{S}_p(w, \zeta_k, b; l) \quad (2.52)$$

$$\hat{L}_p^-(\zeta_k; l) = \hat{L}_p^-(b; l) \hat{T}_p(b, \zeta_k, w; l) + \hat{L}_p^+(w; l) \hat{R}_p(w, \zeta_k, b; l) + \hat{S}_p(b, \zeta_k, w; l) \quad (2.53)$$

Note-se que, geralmente, não há luz proveniente do fundo ($\hat{L}_p^-(b; l) = 0$), o que torna desnecessário o cálculo de $\hat{R}_p(b, \zeta_k, w; l)$ e $\hat{T}_p(b, \zeta_k, w; l)$.

Os operadores de 4 índices podem ser deduzidos intuitivamente, e são calculados a partir dos operadores de 3 índices fornecidos pela integração das equações de Riccati, conforme a seguir. Tome-se primeiramente $\hat{T}_p(w, \zeta_k, b; l)$, que expressa como a luz é transmitida através da camada entre w e ζ_k , incorporando como condição de contorno a camada entre ζ_k e b . Pode-se dizer que a parcela de luz transmitida, no caso para baixo, é dada por $\hat{T}(w, \zeta_k; l)$ (que expressa como a luz é transmitida através da camada *sem* condições de contorno) *mais* a fração da luz refletida para cima na interface da camada adjacente $\zeta_k - b$, dada por $\hat{R}_p(\zeta_k, b; l)$, que é re-refletida para baixo pela própria camada considerada, dada por $\hat{R}_p(\zeta_k, w; l)$. Essas reflexões recíprocas sucedem-se **infinitamente**, de forma que se pode escrever:

$$\begin{aligned} \hat{T}_p(w, \zeta_k, b; l) = \hat{T}_p(w, \zeta_k; l) [& \mathbf{I} + \hat{R}_p(\zeta_k, b; l) \hat{R}_p(\zeta_k, w; l) \\ & + [\hat{R}_p(\zeta_k, b; l) \hat{R}_p(\zeta_k, w; l)]^2 + \\ & + [\hat{R}_p(\zeta_k, b; l) \hat{R}_p(\zeta_k, w; l)]^3 + \dots] \end{aligned} \quad (2.54)$$

essa série infinita pode ser representada por:

$$\hat{T}_p(w, \zeta_k, b; l) \equiv \hat{T}_p(w, \zeta_k; l) [\mathbf{I} - \hat{R}_p(\zeta_k, b; l) \hat{R}_p(\zeta_k, w; l)]^{-1} \quad (2.55)$$

O outro operador necessário, $\hat{R}_p(w, \zeta_k, b; l)$, que expressa como a luz incidente para baixo é refletida pela camada de água entre w e ζ_k , sujeita à existência da camada adjacente entre ζ_k e b , é simplesmente dado por:

$$\begin{aligned} \hat{R}_p(w, \zeta_k, b; l) &= \hat{T}_p(w, \zeta_k, b; l) \hat{R}_p(\zeta_k, b; l) \quad \text{ou seja,} \\ \hat{R}_p(w, \zeta_k, b; l) &= \hat{T}(w, \zeta_k; l) [\mathbf{I} - \hat{R}_p(\zeta_k, b; l) \hat{R}_p(\zeta_k, w; l)]^{-1} \hat{R}_p(\zeta_k, b; l) \end{aligned} \quad (2.56)$$

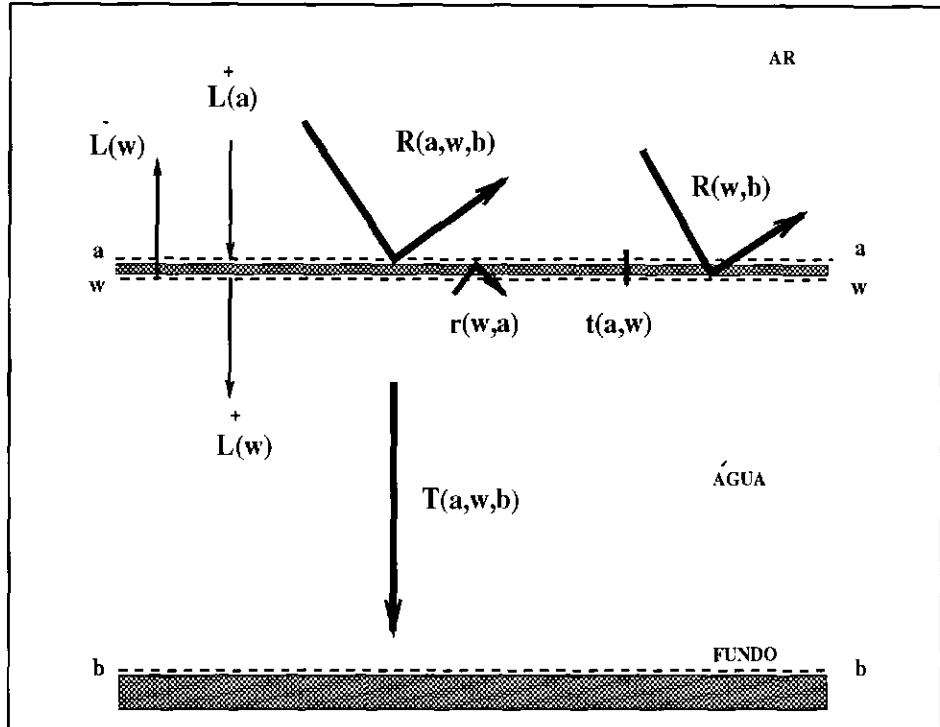


Fig. 2.9 - Operadores \hat{R} e \hat{T} e radiâncias incidentes e emergentes \hat{L} para a camada genérica com interface ar-água.

As expressões para os termos referentes às fontes internas, $\hat{S}_p(w, \zeta_k, b; l)$ e $\hat{S}_p(b, \zeta_k, w; l)$, podem ser deduzidas analogamente.

Assim, conhecidos todos esses operadores, falta apenas, para o cálculo das radiâncias em qualquer nível ζ_k , a amplitude de radiância incidente na água, $\hat{L}_p^+(w)$ (imediatamente abaixo da superfície). Dada uma amplitude de radiância atmosférica ao nível da água, $\hat{L}_p^+(a)$, e supondo-se válido o mesmo princípio da linearidade para a interface ar-água ($a - w$), pode-se obter o operador padrão de transmitância específico, $\hat{T}_p(a, w, b)$, e calcular $\hat{L}_p^+(w)$, pela regra de inserção invariante abaixo (Figura 2.9):

$$\hat{L}_p^+(w) = \hat{L}_p^+(a) \hat{T}_p(a, w, b) + \hat{S}_p(a, w, b) \quad (2.57)$$

Nota-se que, nesta expressão, os modos l não estão desacoplados e as matrizes têm dimensão $n \times m \times n \times m$. Definindo-se os operadores $\hat{t}_p(a, w)$ e $\hat{r}_p(w, a)$ para expressar, respectivamente, a transmitância e a reflectância, ambas para baixo, da interface $a - w$, pode-se definir:

$$\hat{T}_p(a, w, b) \equiv \hat{t}_p(a, w) [\mathbf{I} - \hat{R}_p(w, b) \hat{r}_p(w, a)]^{-1} \quad (2.58)$$

Aqui, $\hat{R}_p(w, b)$ expressa a reflectância de toda a camada de água ($\zeta_k = w$) e os operadores $\hat{t}_p(a, w)$ e $\hat{r}_p(w, a)$ são calculados, no modelo direto utilizado, por um

método de Monte Carlo. O termo fonte é expresso de maneira similar, a partir de $\hat{S}_p(b, w)$ e supõe-se ausência de fontes em $a - w$. Outra incógnita é a radiância emergente da água, dada pela seguinte regra:

$$\hat{L}_p^-(w) = \hat{L}_p^+(a) \hat{R}_p(a, w, b) + \hat{S}_p(b, w, a) \quad (2.59)$$

Definindo-se o operador de reflectância $\hat{R}_p(a, w, b)$ total a partir da reflectância $\hat{R}_p(w, b)$ da camada de água sem a interface $a - w$:

$$\hat{R}_p(a, w, b) \equiv \hat{t}_p(a, w) [\mathbf{I} - \hat{R}_p(w, b) r_p(w, a)]^{-1} \hat{R}_p(w, b) \quad (2.60)$$

Resumindo-se a metodologia de inserção invariante utilizada:

- calculam-se os operadores padrão para os níveis ζ_k desejados, pela integração das equações de Riccati, Equações 2.38 - 2.49;
- obtêm-se, pelas definições dadas pelas Equações 2.55 - 2.60, os operadores “compostos”;
- usa-se a regra de inserção invariante dada pela Equação 2.57 para se achar a radiância incidente na água, $\hat{L}_p^+(w)$, a partir da radiância atmosférica $\hat{L}_p^+(a)$;
- as regras, dadas pelas Equações 2.52 e 2.53, fornecem então as radiâncias $\hat{L}_p(\zeta_k; l)$ para cada nível ζ_k e cada modo azimutal l ;
- calcula-se, pela regra dada pela Equação 2.59, a radiância emergente da água $\hat{L}_p^-(w)$;
- finalmente, a partir das amplitudes espectrais de radiâncias, calculam-se as radiâncias (*não-espectrais*), a partir da Equação 2.28;

2.6 O código Hydrolight

A resolução da equação íntegro-diferencial de transferência radiativa, espectral (λ escolhido), unidimensional (em profundidade) e estacionária foi efetuada pelo código Hydrolight 3.0 (34), que implementa a metodologia de inserção invariante descrita acima. O conjunto de programas que constituem o algoritmo de inversão e o software Hydrolight foi escrito e compilado na linguagem Fortran-77 (15) (16) e executado para os inúmeros casos de teste, numa estação de trabalho Digital Alpha Sable 2100/200.

Os dados de entrada do Hydrolight 3.0 incluem, para o comprimento de onda considerado, os perfis verticais dos coeficientes de absorção e de espalhamento e características da luz atmosférica incidente sobre a superfície da água, da interface ar-água sujeita a ventos e do fundo (da coluna d'água) considerado. O usuário deve selecionar um conjunto de profundidades (igualmente espaçadas ou

não) de interesse. O modelo permite incluir fontes internas tais como bioluminescência, fluorescência e espalhamento de Raman (definidos no Capítulo 4). As saídas incluem, para as profundidades escolhidas, valores selecionados do campo de radiâncias e as irradiâncias planas e escalares, ascendentes e descendentes.

O software Hydrolight compõe-se de rotinas específicas de transferência radiativa, de resolução do modelo direto via inserção invariante e de modelamento da interface ar-água e outras condições de contorno. Compõe-se também de rotinas de domínio público das bibliotecas LAPACK (*Linear Algebra PACKage*) e BLAS (*Basic Linear Algebra Subroutines*) e de algumas rotinas extraídas de *Numerical Recipes* (43), tais como a que utiliza um algoritmo de Runge-Kutta de alta ordem para resolver as equações de Riccati. Assim, como se utilizam rotinas padrão, esse software possui um bom potencial em termos de otimização do tempo de processamento através da implementação de algoritmos mais eficientes.

É possível substituir, nesse software, certas rotinas específicas por outras, permitindo ao usuário incorporar seus próprios modelos, como ocorreu no caso da rotina que modela bioluminescência e com aquelas relativas à função de fase e aos coeficientes de absorção e de espalhamento.

Um aspecto importante que deve ser salientado, é que no Hydrolight, alguns processamentos mais demorados são efetuados previamente, gerando arquivos com dados que serão utilizados na resolução da equação de transferência radiativa. Isso se aplica ao modelamento da interface ar-água e à discretização da função de fase, ambas ditadas pela discretização polar e azimutal em *quads* escolhida para o problema. Conforme anteriormente mencionado, adotaram-se sempre os valores 20, para discretização do ângulo polar ($0 \leq \theta \leq \pi$), e 24 para o azimutal ($0 \leq \theta \leq 2\pi$). O usuário pode também escolher qual será o critério adotado na divisão em *quads*, no caso escolhendo-se sempre *quads* com $\Delta \theta$ constante, opção comumente adotada, e não *quads* com ângulo sólido constante, pois estes últimos são imprecisos, em termos de resolução polar, para direções próximas à normal (os *quads* correspondentes são “alongados”, cobrindo uma faixa extensa de ângulos polares num mesmo *quad*).

O modelamento da interface ar-água é feito através de um *ray-tracing* de raios luminosos, utilizando um método de Monte Carlo, e depende também de um parâmetro que fixa o número de raios que serão “lançados” por *quad*. Valores mínimos recomendáveis são 500 raios para ventos de baixa intensidade (abaixo de 2 m/s) e 5000 raios para os de alta intensidade (acima de 10 m/s). Por último, há dependência do módulo da velocidade do vento, pois visa-se modelar uma superfície determinada pelas ondas devidas ao vento. Nas inversões efetuadas, considerou-se sempre ausência de vento, mas foram “lançados” 2000 raios por *quad*.

Feitos esses processamentos preliminares, várias simulações podem ser efetuadas, sem que se tenha necessidade de refazê-los, desde que, obviamente os parâmetros pertinentes sejam mantidos. Isso poupa tempo de processamento e possibilita uma ampla gama de escolhas relativas a IOP's, condições de iluminação

atmosférica, etc. nas novas simulações, uma vez que a única variável ambiental que não pode ser alterada é a velocidade do vento.

CAPÍTULO 3

FORMULAÇÃO DO PROBLEMA INVERSO

3.1 Problemas Inversos em Ótica Hidrológica

Citando o físico russo O.M. Alifanov, “a solução de um problema inverso engloba determinar causas desconhecidas a partir da observação de seus efeitos” (68). Definem-se problemas inversos em oposição aos correspondentes problemas diretos, cuja resolução implica na determinação dos efeitos com base no conhecimento completo das causas. Neste trabalho, associam-se às causas um conjunto de parâmetros a serem determinados (incógnitas) e aos efeitos, um conjunto conhecido de dados observados, de forma que a utilização daqueles parâmetros no problema direto geraria os mesmos dados observados, como pode ser observado na Figura 3.1.

Problemas inversos são matematicamente mal-postos (*ill-posed*), uma vez que a existência, unicidade e estabilidade das soluções não podem ser assegurados. Este último item os classifica também como sendo mal condicionados. São comuns em muitas áreas da ciência e engenharia, tendo portanto uma papel da maior importância e constituindo um foco de pesquisa multidisciplinar. Podem-se citar, dentre os problemas inversos, reconstruções de estruturas orgânicas por tomografia médica, análise de falhas em materiais compostos por tomografia infra-vermelha, detecção de estruturas geológicas a partir de anomalias no campo geomagnético, estimação de perfis verticais da temperatura atmosférica a por sensoriamento remoto, ou otimização de parâmetros em projeto estrutural de satélites.

As técnicas clássicas para resolução de problemas inversos incorrem em duas categorias: métodos **explícitos** e **implícitos**.

3.1.1 Métodos Explícitos

Nestes métodos, os dados observados e o conjunto de parâmetros podem ser relacionados por uma aplicação direta inversível. Face à impossibilidade frequente de encontrar as expressões matemáticas que constituam inversões de leis conhecidas, estes métodos não são muito utilizados. Há casos em que uma tal expressão analítica para a inversão pode ser obtida mediante simplificações, mas mesmo assim, tais métodos são vulneráveis a ruídos nos dados observados, “não podendo tratar incertezas e redundâncias nos dados de uma maneira natural” (59).

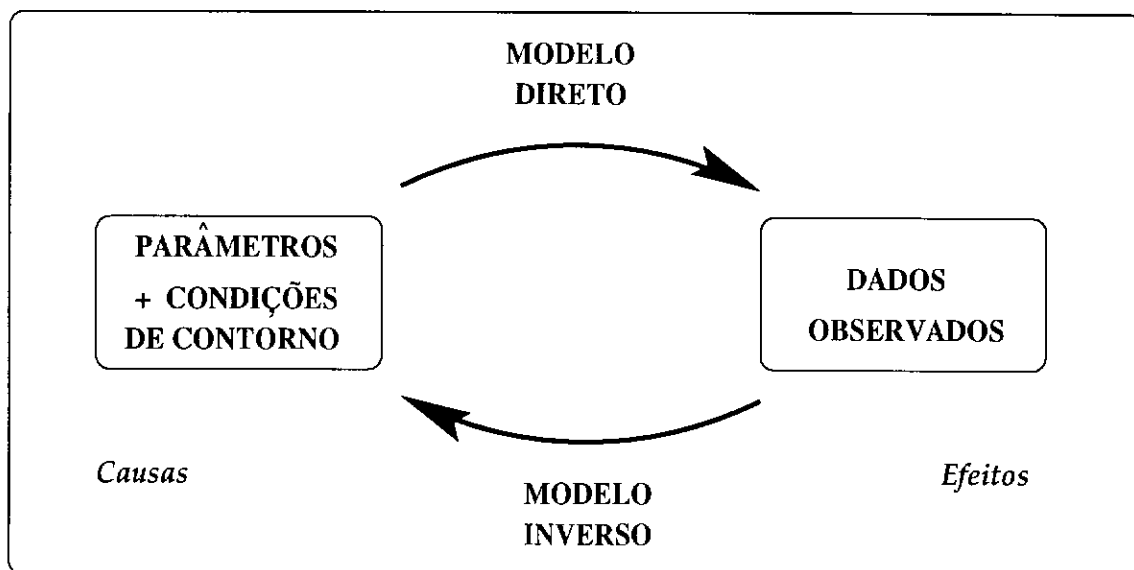


Fig. 3.1 - Modelo Direto e Modelo Inverso

A título de exemplo de método de inversão explícito em Ótica Hidrológica, cita-se aqui uma aproximação conhecida como *lei de Gershun*, que constitui uma aproximação analítica, ou seja, um método de inversão explícito, para reconstrução do coeficiente de absorção a . Sua dedução é feita a partir de uma forma particular da equação de transferência radiativa, unidimensional e estacionária (conforme abordada no Capítulo 2), para irradiâncias (33):

$$\frac{d}{dz} [E_d - E_u] = -a [E_{0d} + E_{0u}] + E^{I+S} \quad (Wm^{-3}nm^{-1}), \quad (3.1)$$

onde o termo E^{I+S} engloba os efeitos de espalhamento inelástico e as fontes internas. Desprezando-se este termo, obtém-se a lei de Gershun:

$$\frac{d}{dz} [E_d - E_u] = -a [E_{0d} + E_{0u}]. \quad (3.2)$$

Essa expressão, que relaciona irradiâncias planas e escalares, para o comprimento de onda λ considerado, é às vezes utilizada, a partir de medidas *in situ*, para verificar grosseiramente o valor de a . Pode ser utilizada também para verificação de consistência em modelos numéricos.

3.1.2 Métodos Implícitos

Nos métodos implícitos, que podem ser enquadrados na classe de problemas de otimização, o espaço de soluções é perscrutado iterativamente, de forma que, a cada iteração, uma instância deste, isto é, um conjunto candidato de parâmetros é usado na resolução do problema direto correspondente. Os dados assim gerados são comparados com os dados de entrada conhecidos, o que realimenta

o processo através da escolha de uma nova solução candidata. O processo termina quando uma solução ótima leva a resultados suficientemente próximos dos dados observados, em termos da norma adotada (por exemplo, norma L_2).

Novas técnicas vem sendo propostas para os métodos implícitos (38) (14), tais como busca adaptativa baseada em algoritmos de computação evolutiva (por exemplo, algoritmos genéticos (46) (18) (57)), na tentativa de se obter, em relação aos algoritmos clássicos, maior robustez, capacidade de busca global e potencial de paralelização. Técnicas baseadas em t mpera simulada (*simulated annealing* (56)) come am a ser utilizadas. Redes neurais, eficientes aproximadores de fun es, tamb m podem vir a desempenhar um papel importante na parte de regulariza o, vista adiante. Esquemas h bridos, que combinam m todos cl ssicos com essas novas t cnicas, poderiam utilizar algoritmos evolutivos para uma busca inicial, de car ter global, e   continua o, recorrer a algoritmos cl ssicos para a subsequente busca de car ter local. O presente trabalho faz uso de uma metodologia de invers o impl cita, com uso de algoritmos cl ssicos.

3.2 Metodologia Iterativa Adotada

Tratam-se, neste trabalho, de problemas inversos relacionados    tica Hidrol gica, ou seja, relacionados com a propaga o da luz em  guas naturais, sejam  guas salgadas (no esc po da Oceanografia) ou doces (no da Limnologia). O problema direto associado   modelado pela equa o de transfer ncia radiativa, que permite calcular a intensidade da luz no interior da  gua em fun o da luz atmosf rica incidente e das condi es de contorno e par metros f sicos envolvidos.

O problema inverso objetiva estimar parametros oceanogr ficos a partir de dados experimentais, no caso irradi ncias. Num esquema iterativo, a partir de uma estimativa inicial dos par metros, novas estimativas candidatas s o geradas sucessivamente. A partir de cada conjunto de par metros, a resolu o do modelo direto fornece irradi ncias de sa da, que s o comparadas com os dados experimentais. A solu o ideal geraria, caso n o houvesse ru do nos dados observados, irradi ncias iguais  s experimentais, para as condi es de contorno estabelecidas.

Na estima o do perfil vertical de bioluminesc ncia, o conjunto de par metros s o as intensidades de bioluminesc ncia correspondentes a fontes gaussianas igualmente espa adas. Quando da estima o de perfis verticais dos coeficientes de absor o ou de albedo, o conjunto de par metros s o os valores desses coeficientes em profundidades igualmente espa adas.

A avalia o das solu es candidatas   feito por meio da *fun o objetivo*, na qual cada ponto corresponde a uma solu o candidata, e que mede a dist ncia, numa norma apropriada, entre as irradi ncias geradas pelo modelo direto para a solu o candidata e as irradi ncias experimentais.

O conjunto de N_p par metros desconhecidos, cada um correspondente a uma profundidade,   representado por $\mathbf{p} = [p_1, p_2, \dots, p_{N_p}]$. O algoritmo de

inversão estima o vetor \mathbf{p} de forma a minimizar a função $J(\mathbf{p})$, sujeita a limites simples em \mathbf{p} . Assim, o problema inverso pode ser considerado como um problema de minimização não-linear, com restrições, como abaixo:

$$\text{minimizar } J(\mathbf{p}); \text{ sujeito a } l_i \leq p_i \leq u_i;$$

onde l_i e u_i ($i = 1, 2, \dots, N_p$) são os limites inferiores e superiores para os parâmetros considerados, escolhidos de forma a se obter uma solução dentro de limites fisicamente aceitáveis.

Este problema é resolvido iterativamente pelo algoritmo de otimização quasi-newtoniano implementado na rotina E04UCF da biblioteca NAG Fortran (37). Esse enfoque foi anteriormente adotado em (44) e (45). Esta rotina destina-se a minimizar funções arbitrariamente suaves, sujeitas a restrições (limites discretos, curvas limite lineares ou não-lineares), por meio de método de programação sequencial. A n -ésima iteração, genérica, pode ser descrita como:

- 1) Resolução do problema direto para $\mathbf{p}^{(n)}$ e cálculo da função objetivo $J(\mathbf{p}^{(n)})$.
- 2) Cálculo, por diferenças finitas, do gradiente $\nabla J(\mathbf{p}^{(n)})$.
- 3) Cômputo de uma aproximação quasi-newtoniana positiva-definida para o Hessiano $\mathbf{H}^{(n)}$ da função objetivo:

$$\mathbf{H}^{(n)} = \mathbf{H}^{(n-1)} + \frac{\mathbf{b}^{(n)} (\mathbf{b}^{(n)})^T}{(\mathbf{b}^{(n)})^T \mathbf{u}^{(n)}} - \frac{\mathbf{H}^{(n-1)} \mathbf{u}^{(n)} (\mathbf{u}^{(n)})^T \mathbf{H}^{(n-1)}}{(\mathbf{u}^{(n)})^T \mathbf{H}^{(n-1)} \mathbf{u}^{(n)}}$$

$$\text{onde } \mathbf{b}^{(n)} = \mathbf{p}^{(n)} - \mathbf{p}^{(n-1)} \text{ e } \mathbf{u}^{(n)} = \nabla J(\mathbf{p}^{(n)}) - \nabla J(\mathbf{p}^{(n-1)})$$

- 4) Cômputo da direção de busca $\mathbf{d}^{(n)}$ como solução do seguinte subproblema de programação quadrática:

$$\text{minimizar } \left[\nabla J(\mathbf{p}^{(n)}) \right]^T \mathbf{d}^{(n)} + \frac{1}{2} (\mathbf{d}^{(n)})^T (\mathbf{H}^{(n)}) \mathbf{d}^{(n)} ;$$

$$\text{sujeito a } l_i - p_i^{(n)} \leq d_i \leq u_i - p_i^{(n)} ;$$

- 5) Cálculo de um passo $\beta^{(n)}$ que minimize $J(\mathbf{p}^{(n)} + \beta^{(n)} \mathbf{d}^{(n)})$.
- 6) Atribuição de $\mathbf{p}^{(n+1)} = \mathbf{p}^{(n)} + \beta^{(n)} \mathbf{d}^{(n)}$.
- 7) Teste de convergência: parada ou retorno à etapa 1.

Os dados observados são constituídos pelas irradiâncias planas ascendentes e descendentes (E_u e E_d) e pelas irradiâncias escalares (E_{0d} e E_{0u}) ascendentes e descendentes, para $i = 1, 2, \dots, N_z$ profundidades. Estas podem ser igualmente espaçadas, definindo uma “grade de irradiâncias” de resolução

$$\Delta z_E = z_{max}/N_z$$

onde z_{max} corresponde à profundidade máxima. Estas N_z profundidades poderiam também ter espaçamento arbitrário.

No presente trabalho, a função objetivo $J(\mathbf{p})$ é expressa, na ausência de ruído, por $R(\mathbf{p})$, correspondente à soma dos quadrados das diferenças entre as irradiâncias geradas pelo modelo direto para a solução candidata (\mathbf{p}) e os dados experimentais (\mathbf{exp}):

$$R(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N_z} \left[(E_{u_i}^{\text{exp}} - E_{u_i}^{\text{p}})^2 + (E_{d_i}^{\text{exp}} - E_{d_i}^{\text{p}})^2 + (E_{0u_i}^{\text{exp}} - E_{0u_i}^{\text{p}})^2 + (E_{0d_i}^{\text{exp}} - E_{0d_i}^{\text{p}})^2 \right] \quad (3.3)$$

ou seja:

$$J(\mathbf{p}) = R(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N_z} R_i(\mathbf{p}), \quad (3.4)$$

onde

$$R_i(\mathbf{p}) = \left[(E_{u_i}^{\text{exp}} - E_{u_i}^{\text{p}})^2 + (E_{d_i}^{\text{exp}} - E_{d_i}^{\text{p}})^2 + (E_{0u_i}^{\text{exp}} - E_{0u_i}^{\text{p}})^2 + (E_{0d_i}^{\text{exp}} - E_{0d_i}^{\text{p}})^2 \right].$$

No caso de dados com ruído, como será visto adiante, acrescenta-se um termo de *regularização* a $J(\mathbf{p})$.

3.2.1 Fator de Correção Relativa à Profundidade

Em (58), foi proposta uma correção na função objetivo, com o intuito de considerar a influência das irradiâncias correspondentes às profundidades maiores, que chegam a ser uma ou duas ordens de grandeza menores que aquela próximas à superfície. O algoritmo de otimização faz eventuais ajustes nos elementos do vetor de parâmetros \mathbf{p} a ser estimado, mas a função objetivo pode não ter sensibilidade para os ajustes feitos nos elementos das profundidades maiores, devido à pequena influência das correspondentes irradiâncias. Cada valor $R_i(\mathbf{p})$ é corrigido por um fator adimensional Z_i ,

$$Z_i = z_i/L \quad (i = 1, 2, \dots, N_z)$$

onde, z_i é a profundidade (m) e $L = 1 \text{ m}$, de forma que a função objetivo $J(\mathbf{p})$ passa a ser dada por:

$$J(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N_z} \sqrt{e^{Z_i}} [R_i(\mathbf{p})] \quad (3.5)$$

No presente trabalho, é proposto um fator de correção relativa à profundidade baseado no decaimento das irradiâncias com z . Considere-se um feixe de luz incidente na água numa dada direção. Na atenuação sofrida pelo feixe ao atravessar a água, o fator dominante é a absorção, que representa uma perda da

energia radiante no comprimento de onda considerado. Já a perda “líquida” devida ao espalhamento é consideravelmente menor, pois a luz é desviada do feixe para outras direções, mas isso é parcialmente compensado pela parcela de luz de outros feixes que é espalhada na direção original considerada.

Num meio homogêneo, na ausência de espalhamento e de fontes internas, as irradiâncias variariam com $e^{-\zeta}$, onde ζ é a profundidade ótica, segundo a lei de Beer-Bouguer-Lambert (28). Como nos casos abordados não há fontes internas ou então estas tem intensidade pequena, pode-se considerar que, aproximadamente, o decaimento das irradiâncias com a profundidade seja *exponencial*, de acôrdo com esta lei. Gordon (22) estima que o erro cometido com esta hipótese seja de 5 a 10 %, conforme o comprimento de onda. Para cada uma das 4 irradiâncias consideradas (E_u , E_d , E_{0u} e E_{0d}), que constituem os dados experimentais nas $i = 1, 2, \dots, N_z$ profundidades, pode-se ajustar uma exponencial tomando-se os valores na superfície ($i = 1$) e no nível mais profundo considerado ($i = N_z$). Obtém-se assim 4 expoentes, e_u , e_d , e_{0u} e e_{0d} , unicamente a partir desses dados experimentais, sendo o primeiro destes dado por:

$$e_u = E_{uN_z} / E_{u1} ,$$

e os demais expoentes calculados de maneira análoga. Ao se calcular o termo corrigido $R_c(\mathbf{p})$, cada diferença de irradiâncias é dividida pela exponencial correspondente:

$$\begin{aligned} R_c(\mathbf{p}) = & \sum_{i=1}^{N_z} \left[\left[\frac{E_{u_i}^{\text{exp}} - E_{u_i}^{\text{p}}}{e^{e_u}} \right]^2 + \left[\frac{E_{d_i}^{\text{exp}} - E_{d_i}^{\text{p}}}{e^{e_d}} \right]^2 \right. \\ & \left. + \left[\frac{E_{0u_i}^{\text{exp}} - E_{0u_i}^{\text{p}}}{e^{e_{0u}}} \right]^2 + \left[\frac{E_{0d_i}^{\text{exp}} - E_{0d_i}^{\text{p}}}{e^{e_{0d}}} \right]^2 \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

Assim, para dados sem ruído, a função objetivo é dada por:

$$J(\mathbf{p}) = R_c(\mathbf{p}) . \quad (3.7)$$

3.3 Técnicas de Regularização

Dada a natureza mal-posta dos problemas de inversão, a presença de ruído nos dados observados leva, quase sempre, a soluções instáveis. Quando o conjunto de parâmetros constitui um perfil, ou seja, uma distribuição espacial de uma dada grandeza, como é o caso do presente trabalho, esses efeitos indesejados traduzem-se por oscilações bruscas para cima ou para baixo, na forma de picos (*spikes*).

Para atenuar esses picos, recorre-se a técnicas de regularização, destinadas a “suavizar” a distribuição espacial do parâmetro que se deseja estimar, restringindo essas oscilações de forma a se obterem soluções fisicamente aceitáveis. Implementa-se a regularização adicionando-se à Equação 3.4 uma função de regularização $Q(\mathbf{p})$, geralmente ponderada por um multiplicador de Lagrange γ , denominado

parâmetro de regularização. Assim, esta equação pode ser reescrita como:

$$J(\mathbf{p}) = R(\mathbf{p}) + \gamma Q(\mathbf{p}) \quad (3.8)$$

A influência do termo de regularização é “dosada” através do valor do parâmetro γ . Nas secões a seguir, discute-se sobre as funções de regularização $Q(\mathbf{p})$ mais conhecidas e sobre critérios de escolha para γ .

3.3.1 Regularização de Tikhonov

Existem várias técnicas de regularização e estas variam de acôrdo com a escolha da função de regularização (35) (5). Nas técnicas clássicas de regularização, derivadas do método originalmente proposto por Phillips (39), Tikhonov (60) e Twomey (62), a função de regularização $Q(\mathbf{p})$ é expressa por:

- Regularização de ordem 0 (que leva em conta a magnitude dos elementos de \mathbf{p}):

$$Q(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N_p} p_i^2, \quad (3.9)$$

- Regularização de primeira ordem (que considera uma aproximação da primeira derivada de \mathbf{p}):

$$Q(\mathbf{p}) = \sum_{i=2}^{N_p} (p_i - p_{i-1})^2, \quad (3.10)$$

- Regularização de segunda ordem (que considera uma aproximação da segunda derivada de \mathbf{p}):

$$Q(\mathbf{p}) = \sum_{i=2}^{N_p-1} (p_{i+1} - 2p_i + p_{i-1})^2. \quad (3.11)$$

3.3.2 Regularização Entrópica

Utiliza-se neste trabalho a *regularização entrópica* baseada no princípio da máxima entropia. Este princípio, foi proposto pela primeira vez como um método geral de inferência por Jaynes (25), com base na caracterização axiomática da informação de Shannon (50). Desde então, técnicas de regularização baseadas em entropia tem sido aplicadas com sucesso em vários campos, tais como tomografia, radioastronomia e geofísica.

Ao se utilizar regularização por máxima entropia, a função de regularização $Q(\mathbf{p})$ é dada por:

$$Q(\mathbf{p}) = - [S(\mathbf{p})/S_{\max}] , \quad (3.12)$$

onde $S(\mathbf{p})$ é a entropia do vetor \mathbf{p} normalizada pela entropia máxima S_{\max} , explicados adiante. A função objetivo passa a ser expressa como:

$$J(\mathbf{p}) = R(\mathbf{p}) - \gamma [S(\mathbf{p})/S_{\max}] , \quad (3.13)$$

onde, assumindo-se o vetor \mathbf{p} composto de N_p parâmetros não-negativos,

$$S(\mathbf{p}) = - \sum_{q=1}^{N_p} s_q \log(s_q), \quad \text{e} \quad s_q = p_q / \sum_{r=1}^{N_p} p_r . \quad (3.14)$$

A função $S(\mathbf{p})$ alcança seu máximo global quando todos os p_r são iguais, o que corresponde a uma distribuição uniforme ($s_q = 1/N_p$):

$$S(\mathbf{p}) = S_{\max} = \log(N_p).$$

Em oposição, a mínimo nível de entropia (S_{\min}) corresponderia a todos os elementos de \mathbf{p} sendo nulos, exceto um deles. Assim, a regularização por máxima entropia busca, dentre as soluções consistentes com os dados do problema, aquela que é mais suave.

Nos casos abordados neste trabalho, buscam-se soluções constituídas por curvas “suaves”, utilizando-se regularização por máxima entropia de *ordem 0*, isto é, calculada a partir de \mathbf{p} . Ramos e Campos Velho (45) utilizam um termo adicional de regularização com uma medida de entropia calculada a partir do vetor de *primeiras diferenças* de \mathbf{p} , propondo uma regularização por *mínima entropia de ordem 1*, que objetiva buscar soluções localmente suaves separadas por descontinuidades abruptas.

3.3.3 Escolha do Parâmetro de Regularização

A escolha do valor do parâmetro de regularização não segue critérios analíticos exatos, podendo ser qualificada como um procedimento empírico de *tentativa-e-erro*. Em geral, procede-se à inversão do problema para vários valores de γ e avalia-se qual é o valor mais adequado em função da “suavidade” da solução inversa e do valor de $J(\mathbf{p})$. De maneira geral, valores muito altos de γ fornecem curvas excessivamente lisas, tendendo a perder consistência com os dados do problema. Por outro lado, valores muito baixos de γ eliminam a influência da regularização, levando a distribuições irregulares, com picos para cima e para baixo.

Existem exemplos de critérios de escolha do multiplicador γ na literatura. Gull e Daniell (23), propõem que esse valor seja tal que satisfaça a expressão:

$$R(\mathbf{p}) \approx N_z \sigma^2 ,$$

onde σ é o desvio padrão do ruído suposto gaussiano dos dados observados.

Sena e Toksöz (49) sugerem que, a cada iteração, o parâmetro de regularização seja dado por $\gamma = R(\mathbf{p})$, de modo que a função objetivo do problema seja dada por:

$$J(\mathbf{p}) = R(\mathbf{p}) [1 - (S(\mathbf{p})/S_{\max})] \quad (3.15)$$

Como o quociente $S(\mathbf{p})/S_{\max}$ é normalmente pouco menor que 1, garante-se assim que o termo de regularização será da mesma ordem de grandeza que $R(\mathbf{p})$.

CAPÍTULO 4

ESTIMAÇÃO DE FONTES DE BIOLUMINESCÊNCIA

4.1 Fontes Internas de Luz

Em águas naturais, além da luz atmosférica incidente na superfície da água, composta da luz solar direta e da luz difusa proveniente do ar atmosférico, há luz proveniente de fontes de luz internas ao meio ou seja, submersas, que são também computáveis na equação de transferência radiativa. Estas podem ser devidas á chamada emissão *verdadeira*, que se dá quando seres vivos emitem luz, fenômeno denominado *bioluminescência* ou a processos ditos inelásticos, nos quais a luz é absorvida num comprimento de onda e reemitida em outro, como no *espalhamento de Raman* ou no fenômeno de *fluorescência*. Nesses processos inelásticos, define-se um coeficiente de absorção relativo ao comprimento de onda original e um coeficiente de emissão relativo ao comprimento de onda no qual essa energia absorvida é reemitida. Esses processos são também chamados de *trans-espectrais*, uma vez que a energia migra de um comprimento de onda para outro.

Para a água, na faixa de temperaturas ambientes, a emissão de corpo negro é desprezível na faixa de luz visível, não sendo considerada em Ótica Hidrológica. Analisam-se, neste trabalho, apenas casos referentes a bioluminescência, embora o tratamento para fluorescência seja bastante similar, a nível dos problemas inversos propostos.

O termo fonte que aparece na equação de transferência radiativa monocromática (para um dado comprimento λ), cuja unidade é $W m^{-3} sr^{-1} nm^{-1}$, poderia ser escrito como:

$$s(z, \xi) = s_0(z, \xi) \beta^{(s)}(\xi)$$

onde ξ é a direção considerada, s_0 expressa a intensidade da fonte e $\beta^{(s)}$ sua distribuição direcional, esta última com unidade sr^{-1} . No caso de fonte isotrópica, a intensidade é distribuída uniformemente em todas as direções, isto é, em $4\pi sr$ e:

$$s(z, \xi) = \frac{s_0(z, \xi)}{4\pi}$$

4.1.1 Espalhamento de Raman

No espalhamento de Raman na água, a luz é espalhada inelasticamente de comprimentos de onda mais curtos para outros mais longos através do seguinte processo: fótons incidentes, com comprimento de onda λ' são absorvidos por moléculas levando-as a estados quânticos rotacionais ou vibracionais mais elevados e causando a emissão imediata de fótons de comprimento de onda λ maior,

ou seja, de menor energia. A diferença $\lambda - \lambda'$ depende do comprimento de onda da luz incidente λ' e das moléculas do meio, no caso, das moléculas presentes na água, o que faz com que o espalhamento de Raman seja um meio utilizado para sondagem do tipo de moléculas presentes num meio qualquer.

Para o espalhamento de Raman, podem-se definir um coeficiente de absorção, que modela como a luz de comprimento de onda λ' é absorvida pela água, bem como um coeficiente de espalhamento e uma função de fase, que modelam como a luz de comprimento de onda λ' é reemitida com comprimento de onda λ . Assim, este fenômeno pode ser incorporados à equação de transferência radiativa.

Na prática, o efeito do espalhamento de Raman é bem pouco significativo se comparado aos efeitos da absorção e do espalhamento e por isso mesmo de difícil medição. Mesmo para $\lambda' = 400 \text{ nm}$, comprimento de onda onde o coeficiente de absorção de Raman é máximo e o coeficiente de absorção da água pura é mínimo, o primeiro coeficiente não chega a 4 % do valor do último. Sua descoberta, no contexto da Ótica Hidrológica, deveu-se a experimentos oceanográficos nos quais desejava-se estimar *in situ* o coeficiente de absorção num dado comprimento de onda. Algumas vezes, para comprimentos de onda $\lambda > 550 \text{ nm}$ e profundidades de algumas dezenas de metros, encontraram-se valores *menores* que o coeficiente de absorção da água pura, atribuídos inicialmente a problemas de instrumentação, uma vez que naqueles locais não havia bioluminescência ou fluorescência, mas depois explicados pelo espalhamento de Raman.

4.1.2 Fluorescência

A fluorescência assemelha-se ao espalhamento de Raman, no sentido de que fótons são absorvidos e depois emitidos num comprimento de onda maior. Como o intervalo de tempo envolvido, da ordem de 10^{-11} a 10^{-8} segundos, é maior do que no espalhamento de Raman, considera-se que houve absorção seguida de emissão, ao invés de espalhamento. Fala-se também em comprimentos de onda de excitação e de emissão, no lugar de comprimentos de onda incidente e espalhado. Contrariamente ao espalhamento de Raman, que dependia do meio, a fluorescência depende da concentração de determinadas matérias orgânicas ou inorgânicas na água, tais como clorofila.

O comprimento de onda emitido na fluorescência depende totalmente da natureza da substância, e não do comprimento de onda de excitação. Assim, no caso da clorofila-*a*, a banda de fluorescência está centrada em 685 nm , independentemente de a luz excitante ser verde ou azul. No entanto, como a absorção, que inicia o processo, depende do comprimento de onda de excitação, a intensidade da fluorescência varia conforme a cor da luz excitante.

4.2 Bioluminescência

A bioluminescência constitui-se na geração de luz por determinados seres vivos em mares e oceanos. Dentre estes seres, podem-se citar bactérias, algas

e peixes, nas mais diversas profundidades emitindo luz em bandas de comprimentos de onda que chegam, dependendo da espécie, a cobrir todo o espectro visível (de 400 nm a 700 nm).

Alguns seres emitem luz somente quando perturbados, outros para fugir de algum predador e outros ainda para atrair o parceiro/a para reprodução. No entanto, algumas bactérias chegam a emitir luz continuamente. O comprimento de onda de emissão máxima varia aproximadamente de 440 nm a 570 nm para a maioria dos seres bioluminescentes. As intensidades emitidas também variam grandemente, sendo que certos peixes emitem “flashes” de luz intensos, mas de curta duração, enquanto que bactérias emitem continuamente, mas com intensidades menores.

A irradiância atmosférica total (luz difusa mais luz solar), ao nível do mar, com o sol no zênite e céu claro chega a 500 W.m^{-2} , e cai para cerca 10 W.m^{-2} com o sol no horizonte e céu totalmente encoberto. À noite, essas irradiâncias são da ordem de 10^{-2} W.m^{-2} quando há lua cheia e céu claro e 10^{-6} W.m^{-2} para uma noite estrelada sem lua e com céu claro. Bactérias bioluminescentes, em concentrações típicas, emitem luz continuamente com irradiâncias da ordem de 10^{-5} W.m^{-2} (valor na superfície de uma esfera de água de 1 m^3 contendo bactérias), suficientes para tornar a superfície do mar luminosa em noites escuras, como às vezes ocorre no Oceano Índico.

Entende-se por estimacão de fontes de bioluminescência como sendo a estimacão da densidade de energia luminosa gerada por esses seres ao longo da faixa de profundidade considerada, ou seja, o perfil vertical dessa densidade. Essa estimacão é importante na Oceanografia, pois está associada à presença e à concentraão das espécies bioluminescentes. A influência da bioluminescência nas irradiâncias medidas no interior da água é normalmente pequena, mas bem localizada verticalmente e para sua estimacão, certas propriedades óticas inerentes da água, tais como o coeficiente de absorão e o albedo de espalhamento simples tem que ser fornecidas.

O modelo direto utilizado na inversão reproduz o perfil de bioluminescência por meio de um conjunto de fontes gaussianas **isotrópicas**, igualmente espaçadas ao longo da profundidade, todas com um mesmo desvio padrão σ , mas com intensidades não necessariamente iguais. O vetor de parâmetros $\mathbf{p} = [p_1, p_2, \dots, p_{N_p}]$ a ser estimado constitui-se das intensidades das fontes. Representa-se o termo fonte pela seguinte somatória de fontes gaussianas, para o comprimento de onda λ considerado (54):

$$s(z, \xi) = s(z) = \sum_{k=1}^{N_p} \frac{p_k}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-(z-z_k)^2/2\sigma^2} \quad (4.1)$$

Essas fontes formam uma malha de resoluão $\Delta z_p = z_{max}/N_p$, onde z_{max} corresponde à profundidade máxima considerada. $\xi = (\theta, \phi)$ é a direão consi-

derada, onde θ e ϕ são, respectivamente, o ângulo polar e o azimutal. No entanto, como as fontes foram consideradas isotrópicas, s não varia com ξ .

4.3 Resultados Numéricos

A estimação de perfis verticais de bioluminescência foi efetuada para dados sintéticos, ou seja, simulados em computador, em substituição aos dados experimentais. As reconstruções referem-se às águas da baía de Monterey, EUA, sob luz solar e sem vento, como num trabalho similar (58). Os dados sintéticos foram gerados pelo mesmo modelo analítico direto utilizado na inversão, implementado pelo software Hydrolight 3.0 (34). Esses dados são constituídos pelas irradiâncias E_u , E_d , E_{0u} e E_{0d} igualmente espaçadas, podendo ser gerados para qualquer combinação de fontes gaussianas (desvios padrão σ_i e intensidades p_i não necessariamente iguais) ou não-gaussianas, igualmente espaçadas ou não. Ademais, essas irradiâncias foram corrompidas por ruído gaussiano de 2 %, por meio de uma rotina Fortran.

Nos exemplos, para reproduzir resultados publicados na literatura afim (58), os dados foram sintetizados para uma grade vertical de 11 profundidades, variando de 0 a 30 metros, ou seja, com uma resolução espacial de 3 metros. As propriedades óticas inerentes foram assumidas como sendo constantes: coeficiente de absorção igual a 0.125 e coeficiente de espalhamento igual a 1.205. Foi utilizada a função de Henyey-Greenstein de um só termo (OTHG) (33) como função de fase de espalhamento. A água foi considerada infinitamente profunda e a luz solar, uniformemente distribuída com irradiância escalar descendente de $1 W/m^2nm$. Na geração dos dados sintéticos e na reconstrução, adotou-se um único comprimento de onda, $\lambda = 550nm$, próximo ao comprimentos de onda de máxima emissão de bioluminescência da bactéria *Vibrio fischeri* (33).

Os dados de entrada na inversão incluem o número de fontes N_p e o desvio padrão comum σ , que devem ser escolhidos se possível levando-se em conta a grade de irradiâncias sintéticas ou experimentais. Torna-se conveniente ainda adotar na inversão essa mesma grade de irradiâncias: uma grade de menor resolução (menos pontos) leva, obviamente a uma precisão menor, enquanto que uma grade de maior resolução requereria a interpolação das irradiâncias sintéticas ou experimentais, acarretando possíveis imprecisões, uma vez que a interpolação tende a “suavizar” as curvas das irradiâncias em função da profundidade. Isso é agravado pela presença de ruído e também acarreta maior tempo de processamento.

Como as irradiâncias foram sintetizadas a partir de um perfil de bioluminescência conhecido, o erro RMS (*root mean square*) pôde ser calculado para o perfil estimado na inversão. Esse erro RMS e o valor da função objetivo foram ambos normalizados em relação aos valores da primeira iteração da inversão, isto é, ambos os valores normalizados são iguais à unidade na primeira iteração.

4.3.1 Caso 1 - Perfil Gaussiano Determinado

Inicialmente, considerou-se $N_z = 11$ (11 profundidades) e $N_p = 10$ (10 fontes) na geração dos dados sintéticos e na inversão, ficando as fontes gaussianas nos pontos médios da grade de irradiâncias, no que se denomina *caso 1*. Assim, foi conveniente tomar um desvio padrão $\sigma = 0.75$, de forma a que cada fonte gaussiana se estenda aproximadamente por Δz_E . Para efeito de comparação, as irradiâncias *sem* bioluminescência, são mostradas nas Figuras 4.1 (irradiâncias descendentes) e 4.2 (irradiâncias ascendentes), enquanto que as correspondentes irradiâncias *com* bioluminescência, nas Figuras 4.3 e 4.4. Finalmente, são plotadas, em escala **logarítmica**, as irradiâncias planas ascendentes e descendentes (Figura 4.5) e as irradiâncias escalares ascendentes e descendentes (Figura 4.6), em ambos os casos com e sem bioluminescência, onde se pode apreciar que a influência da bioluminescência é bem maior nas irradiâncias ascendentes, uma vez que estas tem intensidade menor que as descendentes, sendo portanto mais sensíveis ao pequeno acréscimo de intensidade causado pela bioluminescência. As duas fontes gaussianas de bioluminescência, conforme a Equação 4.1 são:

$$\begin{aligned} p_4 &= 16.00 \quad Wm^{-2}sr^{-1}nm^{-1} \quad (z_4 = 10.5 \text{ m}) \\ p_6 &= 5.12 \quad Wm^{-2}sr^{-1}nm^{-1} \quad (z_6 = 16.5 \text{ m}) \end{aligned}$$

Os demais p_k são nulos. Como seria de se esperar, devido à coincidência das grades na geração dos dados sintéticos e no modelo inverso, a Figura 4.7 e as Tabelas 4.1 e 4.2 mostram que o perfil de bioluminescência é facilmente reconstruído, mesmo para dados corrompidos com ruído, para o caso 1, onde se tomam os mesmos N_p (10), σ (0.75) e Δz_E (30.0/10) tanto na geração dos dados sintéticos como na reconstrução.

TABELA 4.1 - INFLUÊNCIA DO RUÍDO NO CASO 1 ($N_p = 10$, $\sigma = 0.75$): VALORES INICIAIS E FINAIS DA FUNÇÃO OBJETIVO.

ruído	função objetivo inicial	função objetivo final
2% ruído	0.104772×10^{-1}	0.197909×10^{-2}
sem ruído	0.915015×10^{-2}	0.205059×10^{-11}

TABELA 4.2 - INFLUÊNCIA DO RUÍDO NO CASO 1 ($N_p = 10$, $\sigma = 0.75$): VALORES NORMALIZADOS DA FUNÇÃO OBJETIVO E DO ERRO RMS.

ruído	função objetivo norm.	erro RMS norm.
2% ruído	0.188895×10^{-0}	0.469201×10^{-1}
sem ruído	0.224105×10^{-9}	0.168945×10^{-4}

A Figura 4.10 ilustra a queda dos valores da função objetivo e do erro RMS com o número de iterações, sem ruído, enquanto que a Figura 4.11 se refere a dados com 2% de ruído. É interessante notar que, embora o algoritmo busque minimizar o valor da função objetivo, nem sempre uma queda deste valor representa um efetivo aprimoramento da solução, que seria expresso por uma correspondente diminuição do erro RMS.

4.3.2 Caso 2 - Perfil Gaussiano Arbitrário

No *caso 2*, tomam-se dados sintéticos correspondentes a um perfil de bioluminescência gerado por fontes gaussianas arbitrárias, isto é, colocadas em profundidades que não correspondem àquelas da grade de resolução Δz_p e com desvios padrão diferentes, mais especificamente 2 fontes gaussianas:

$$\begin{aligned} z_I &= 9.0 \text{ m}, & \sigma_I &= 0.95 & \text{ e } & p_I &= 16.00 \text{ Wm}^{-2}\text{sr}^{-1}\text{nm}^{-1} \\ z_{II} &= 12.0 \text{ m}, & \sigma_{II} &= 1.45 & \text{ e } & p_{II} &= 5.12 \text{ Wm}^{-2}\text{sr}^{-1}\text{nm}^{-1} \end{aligned}$$

Os dados sintéticos também foram corrompidos com ruído de 2%. Como seria de se esperar, a reconstrução foi menos precisa, como se pode ver na Figura 4.8 e Tabelas 4.3 e 4.4.

Para o caso 2, estudou-se a influência do desvio padrão do conjunto de N_p fontes gaussianas, com as quais o modelo inverso modela a bioluminescência, na inversão. Desvios padrão maiores tendem a compensar a diferença de profundidades entre as fontes usadas na sintetização dos dados observados e aquelas do modelo inverso, uma vez que cada fonte passa a abranger uma faixa de profundidades mais extensa. Isto é observado na Figura 4.13 e Tabelas 4.5 e 4.6.

O aumento do número de fontes (N_p) mostra ser uma solução mais eficiente, embora demande um tempo de processamento bem maior. Isso é ilustrado pela Figura 4.12 e Tabelas 4.7 e 4.8.

TABELA 4.3 - INFLUÊNCIA DO RUÍDO NO CASO 2 ($N_p = 10$, $\sigma = 0.75$): VALORES INICIAIS E FINAIS DA FUNÇÃO OBJETIVO.

ruído	função objetivo inicial	função objetivo final
2% ruído	0.112410×10^{-1}	0.902962×10^{-3}
sem ruído	0.114898×10^{-1}	0.481680×10^{-3}

TABELA 4.4 - INFLUÊNCIA DO RUÍDO NO CASO 2 ($N_p = 10$, $\sigma = 0.75$): VALORES NORMALIZADOS DA FUNÇÃO OBJETIVO E DO ERRO RMS.

ruído	função objetivo	erro RMS
2% ruído	0.080329	0.759151
sem ruído	0.041922	0.764241

TABELA 4.5 - INFLUÊNCIA DO DESVIO PADRÃO NO CASO 2 ($N_p = 10$, DADOS COM 2% RUÍDO): VALORES INICIAIS E FINAIS DA FUNÇÃO OBJETIVO.

σ	função objetivo inicial	função objetivo final
0.75	0.112410×10^{-1}	0.902962×10^{-3}
0.95	0.112410×10^{-1}	0.865515×10^{-3}
1.50	0.112410×10^{-1}	0.854633×10^{-3}

TABELA 4.6 - INFLUÊNCIA DO DESVIO PADRÃO NO CASO 2 ($N_p = 10$, DADOS COM 2% RUÍDO): VALORES NORMALIZADOS DA FUNÇÃO OBJETIVO E DO ERRO RMS.

σ	função objetivo norm.	erro RMS norm.
0.75	0.080329	0.759151
0.95	0.076998	0.621056
1.50	0.076030	0.491415

TABELA 4.7 - INFLUÊNCIA DO NÚMERO DE FONTES NO CASO 2 ($\sigma = 0.75$, DADOS COM 2% RUÍDO): VALORES INICIAIS E FINAIS DA FUNÇÃO OBJETIVO.

N_p	função objetivo inicial	função objetivo final
10	0.112410×10^{-1}	0.902962×10^{-3}
13	0.112410×10^{-1}	0.599266×10^{-3}
15	0.112410×10^{-1}	0.494073×10^{-3}

TABELA 4.8 - INFLUÊNCIA DO NÚMERO DE FONTES NO CASO 2 ($\sigma = 0.75$, DADOS COM 2% RUÍDO): VALORES NORMALIZADOS DA FUNÇÃO OBJETIVO E DO ERRO RMS.

N_p	função objetivo norm.	erro RMS norm.
10	0.080329	0.759151
13	0.053312	0.484186
15	0.043954	0.124779

4.3.3 Caso 3 - Perfil Não-Gaussiano

Finalmente, no caso 3, os dados foram sintetizados utilizando-se, para a bioluminescência, a função da retina *s0biolum* que a modela por tangentes hiperbólicas, a qual faz parte do código Hydrolight 3.0. Para o comprimento de onda considerado (550 nm), a bioluminescência é expressa, neste exemplo específico, por (z em m e $s(z, \xi)$ em $Wm^{-3}nm^{-1}$):

$$s(z, \xi) = s(z) = 0.9928 \times 10^{-2} \tanh[0.5(z - 10)] \quad \text{para } z \leq 11.5$$

$$s(z, \xi) = s(z) = 0.9928 \times 10^{-2} \tanh[0.5(13 - z)] \quad \text{para } z > 11.5$$

O efeito do ruído nos dados sintéticos pode ser observado na Figura 4.9 e Tabelas 4.9 e 4.10, enquanto que a influência do desvio padrão na Figura 4.15 e Tabelas 4.11 e 4.12, e a influência do número de fontes, na Figura 4.14 e Tabelas 4.13 e 4.14.

TABELA 4.9 - INFLUÊNCIA DO RUÍDO NO CASO 3 ($N_p = 10$, $\sigma = 0.75$): VALORES INICIAIS E FINAIS DA FUNÇÃO OBJETIVO.

ruído	função objetivo inicial	função objetivo final
2% ruído	0.619633×10^{-2}	0.198227×10^{-2}
sem ruído	0.473748×10^{-2}	0.565984×10^{-4}

TABELA 4.10 - INFLUÊNCIA DO RUÍDO NO CASO 3 ($N_p = 10$, $\sigma = 0.75$): VALORES NORMALIZADOS DA FUNÇÃO OBJETIVO E DO ERRO RMS.

ruído	função objetivo norm.	erro RMS norm.
2% ruído	0.319911	0.539159
sem ruído	0.011947	0.539978

TABELA 4.11 - INFLUÊNCIA DO DESVIO PADRÃO NO CASO 3 ($N_p = 10$, DADOS COM 2% RUÍDO): VALORES INICIAIS E FINAIS DA FUNÇÃO OBJETIVO.

σ	função objetivo inicial	função objetivo final
0.75	0.619633×10^{-2}	0.198227×10^{-2}
0.95	0.619633×10^{-2}	0.197661×10^{-2}
1.50	0.619633×10^{-2}	0.201846×10^{-2}

TABELA 4.12 - INFLUÊNCIA DO DESVIO PADRÃO NO CASO 3 ($N_p = 10$, DADOS COM 2% RUÍDO): VALORES NORMALIZADOS DA FUNÇÃO OBJETIVO E DO ERRO RMS.

σ	função objetivo norm.	erro RMS norm.
0.75	0.319911	0.539159
0.95	0.318997	0.357290
1.50	0.325750	0.229669

TABELA 4.13 - INFLUÊNCIA DO NÚMERO DE FONTES NO CASO 3 ($\sigma = 0.75$, DADOS COM 2% RUÍDO): VALORES INICIAIS E FINAIS DA FUNÇÃO OBJETIVO.

N_p	função objetivo inicial	função objetivo final
10	0.619633×10^{-2}	0.198227×10^{-2}
13	0.619633×10^{-2}	0.192274×10^{-2}
15	0.619633×10^{-2}	0.190639×10^{-2}
20	0.619633×10^{-2}	0.190902×10^{-2}

TABELA 4.14 - INFLUÊNCIA DO NÚMERO DE FONTES NO CASO 3 ($\sigma = 0.75$, DADOS COM 2% RUÍDO): VALORES NORMALIZADOS DA FUNÇÃO OBJETIVO E DO ERRO RMS.

N_p	função objetivo norm.	erro RMS norm.
10	0.319911	0.539159
13	0.310303	0.327487
15	0.307664	0.307550
20	0.308089	0.180156

4.3.4 Análise dos Resultados Obtidos

A estimação de perfis arbitrários de bioluminescência foi conseguida com boa precisão nos casos analisados, mesmo utilizando-se irradiâncias corrompidas com ruído. Esse bom desempenho pode ser explicado pela forte correlação entre o perfil de bioluminescência e as correspondentes irradiâncias para uma dada profundidade.

A influência do número de fontes gaussianas usadas para reproduzir o perfil de bioluminescência e seus desvios padrões foi analisada. De maneira geral, o aumento do número de fontes N_p melhora sensivelmente os resultados, às custas de um tempo de processamento maior. Isto se aplica tipicamente quando N_p é pequeno e as fontes a serem estimadas estão localizadas em profundidades que não coincidem com aquelas das N_p fontes. Já o aumento do desvio padrão não se mostra tão eficiente, em relação a essas não-coincidências, embora não acarrete um maior tempo de computação.

Os resultados mostram que nem sempre há correlação entre os valores da função objetivo e aqueles do erro RMS. O algoritmo de inversão busca minimizar a função objetivo e, naturalmente, não dispõe informação sobre o erro RMS.

Não houve necessidade de se utilizar o fator de correção de profundidade para a função objetivo, definido anteriormente, no qual a diferença de mínimos quadrados é multiplicada por $\sqrt{e^Z}$. Isso seria indicado para estimar fontes a profundidades maiores, nas quais as irradiâncias são algumas ordens de grandeza menores que aquelas na superfície.

Um ponto que merece destaque é que a representação da bioluminescência por um conjunto de gaussianas dispensa o uso de qualquer técnica de regularização no caso de dados com ruído, uma vez que essas funções são inerentemente suaves.

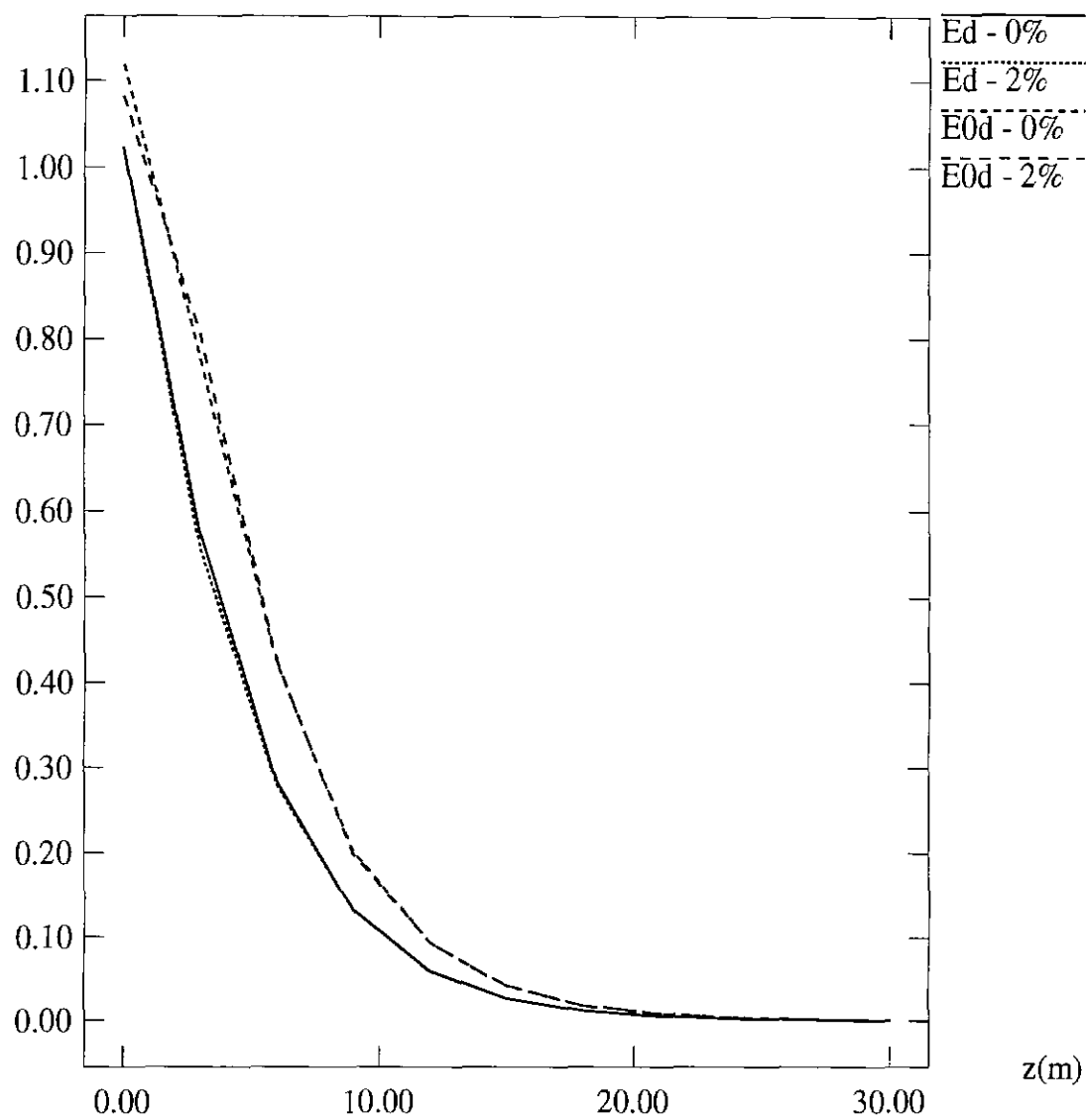
irrad. (W/m².nm)

Fig. 4.1 - Perfil vertical de irradiâncias plana e escalar descendentes, sem bioluminescência (caso 1).

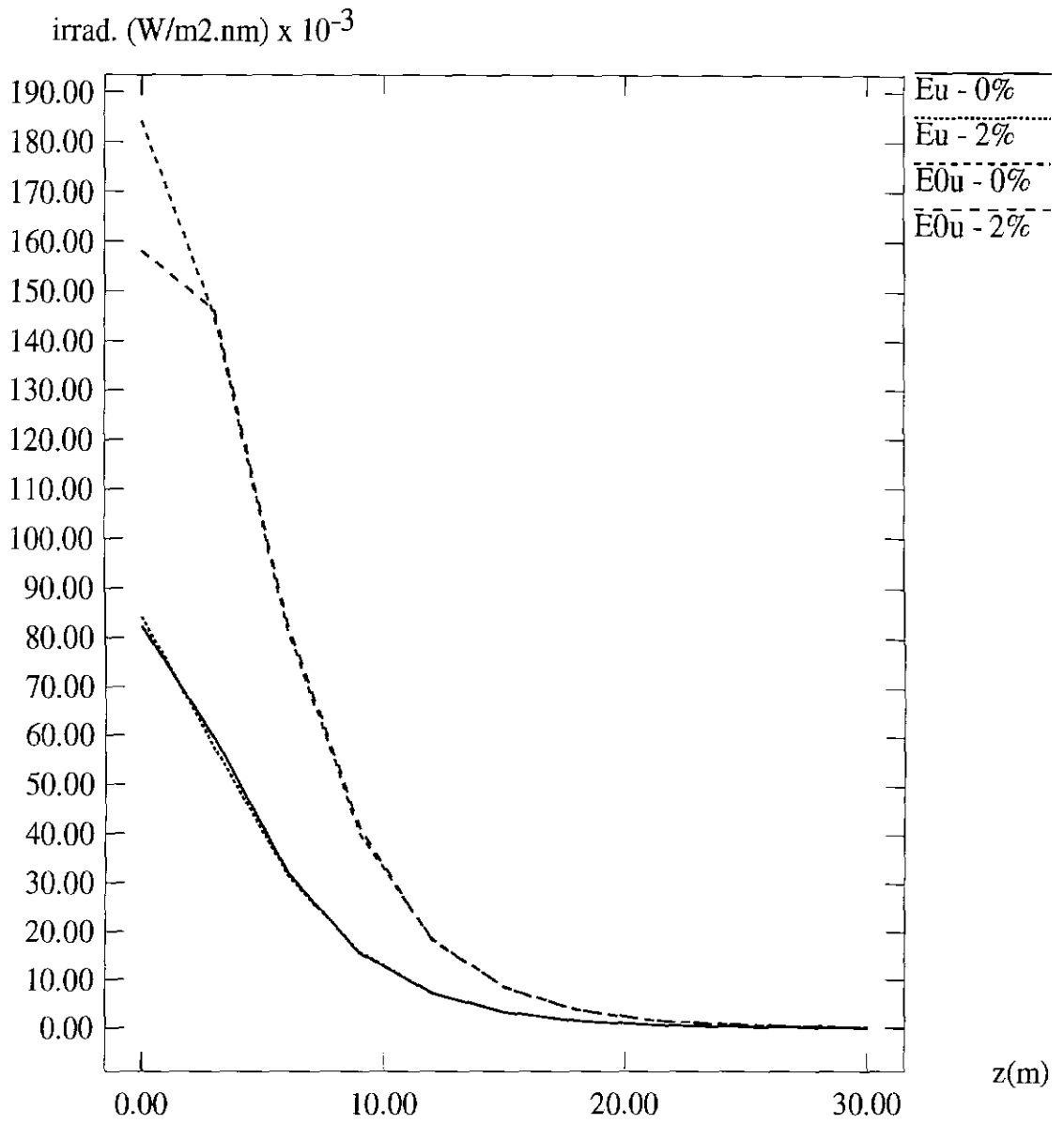


Fig. 4.2 - Perfil vertical de irradiâncias plana e escalar ascendentes, sem bioluminescência (caso 1).

irrad. (W/m².nm)

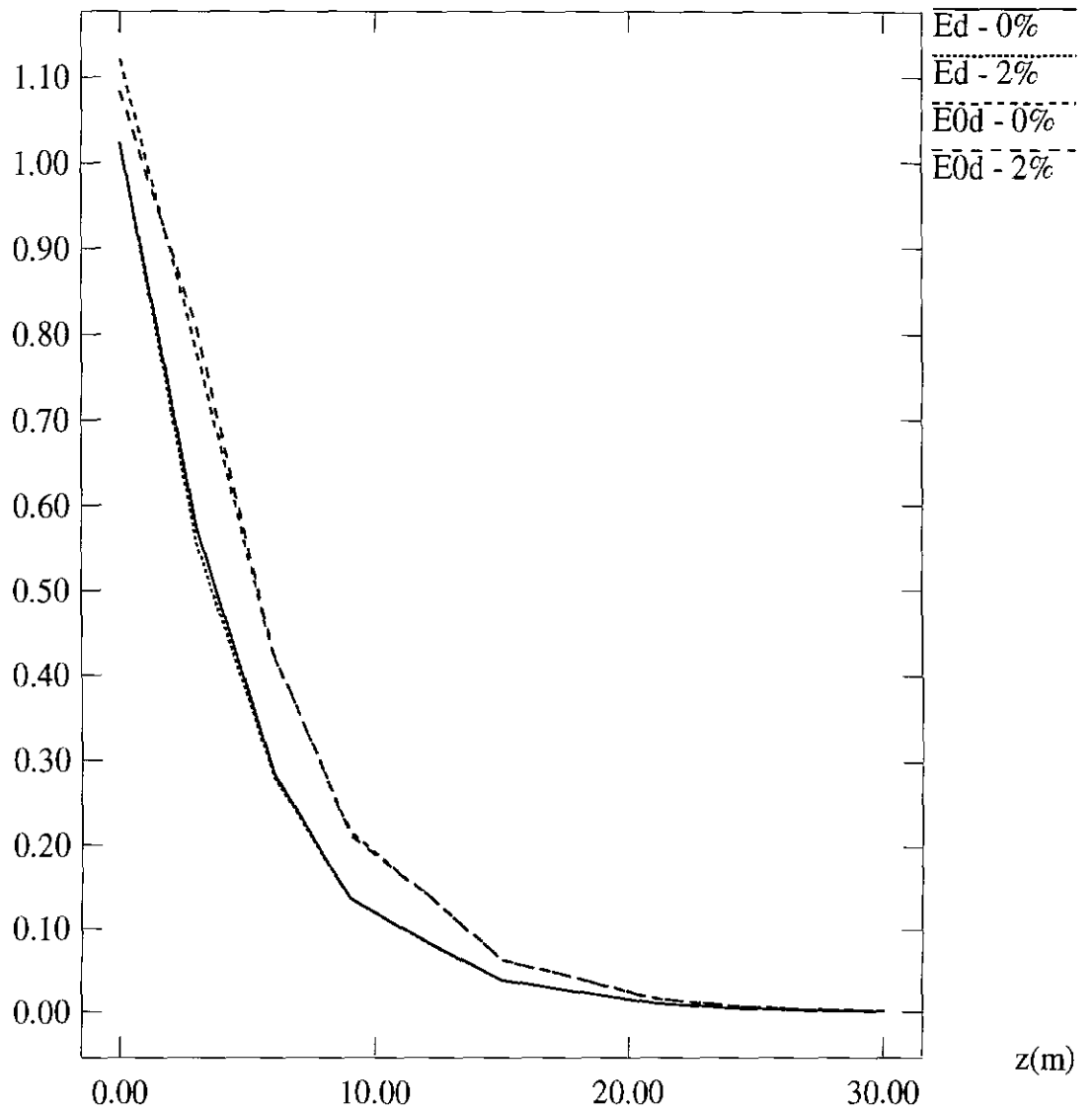


Fig. 4.3 - Perfil vertical de irradiâncias plana e escalar descendentes, com bioluminescência (caso 1).

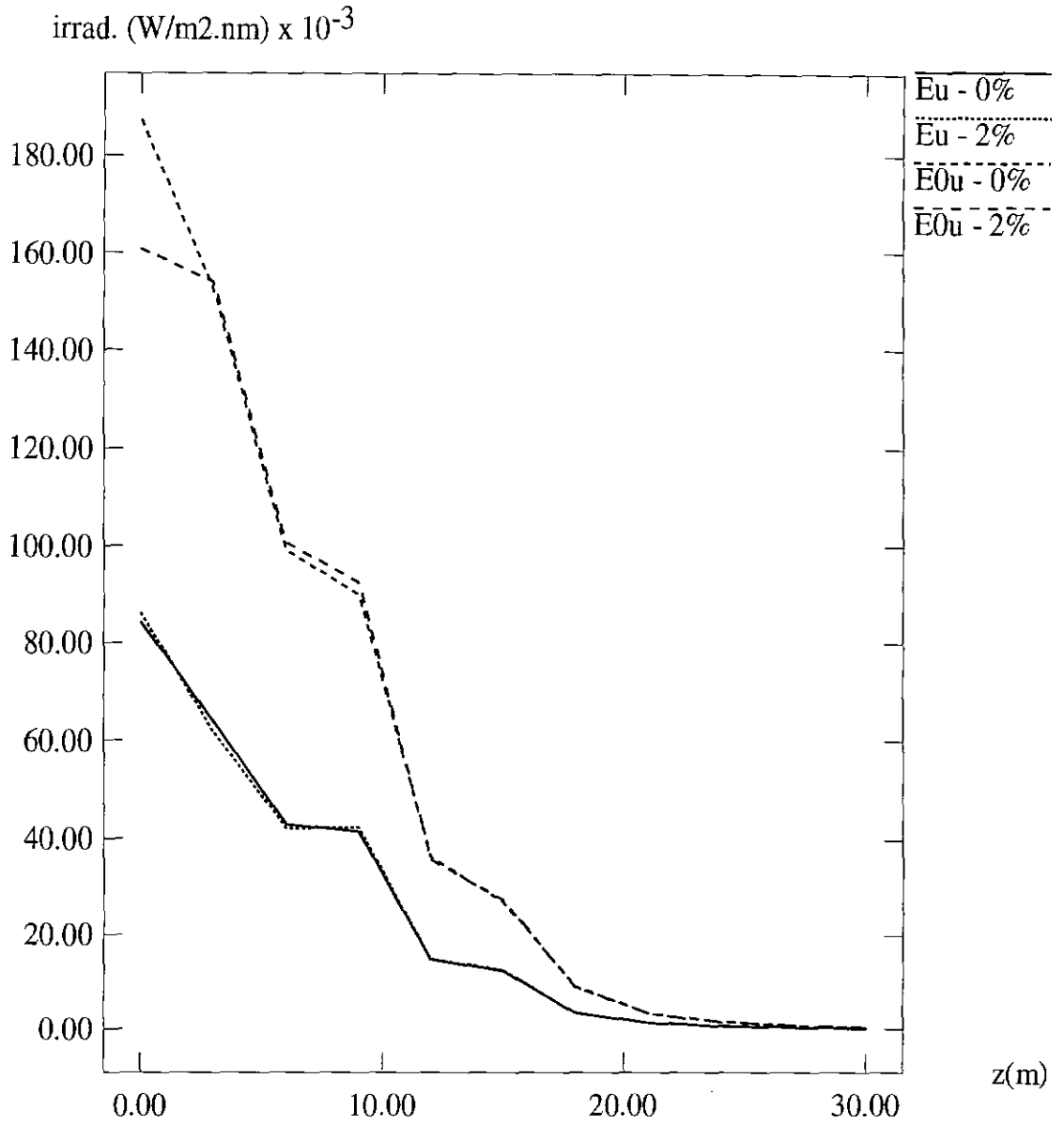


Fig. 4.4 - Perfil vertical de irradiâncias plana e escalar ascendentes, com bioluminescência (caso 1).

irrad. (W/m².nm)

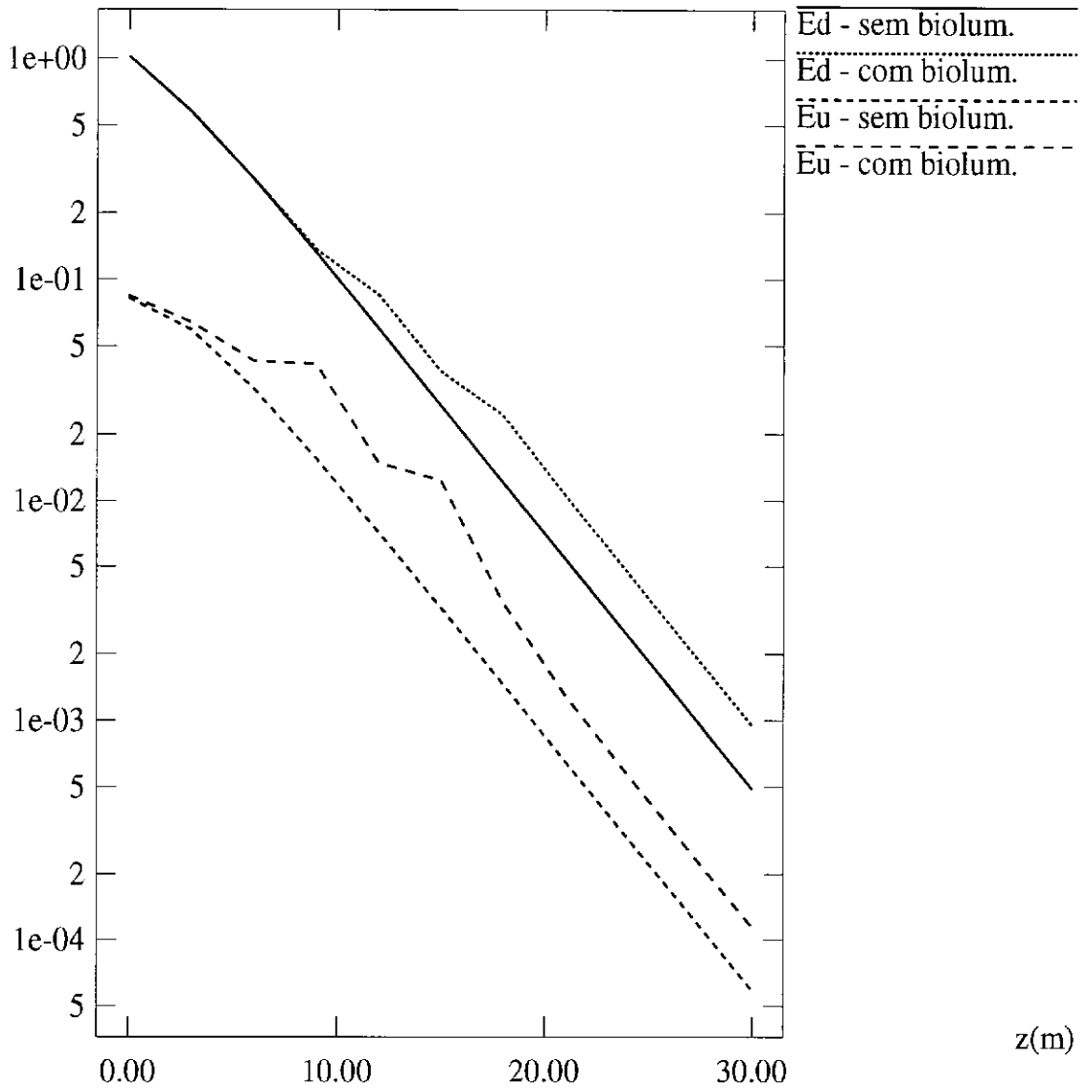


Fig. 4.5 - Influência da bioluminescência no perfil vertical de irradiâncias planas (caso 1, irradiâncias em escala logarítmica).

irrad. (W/m².nm)

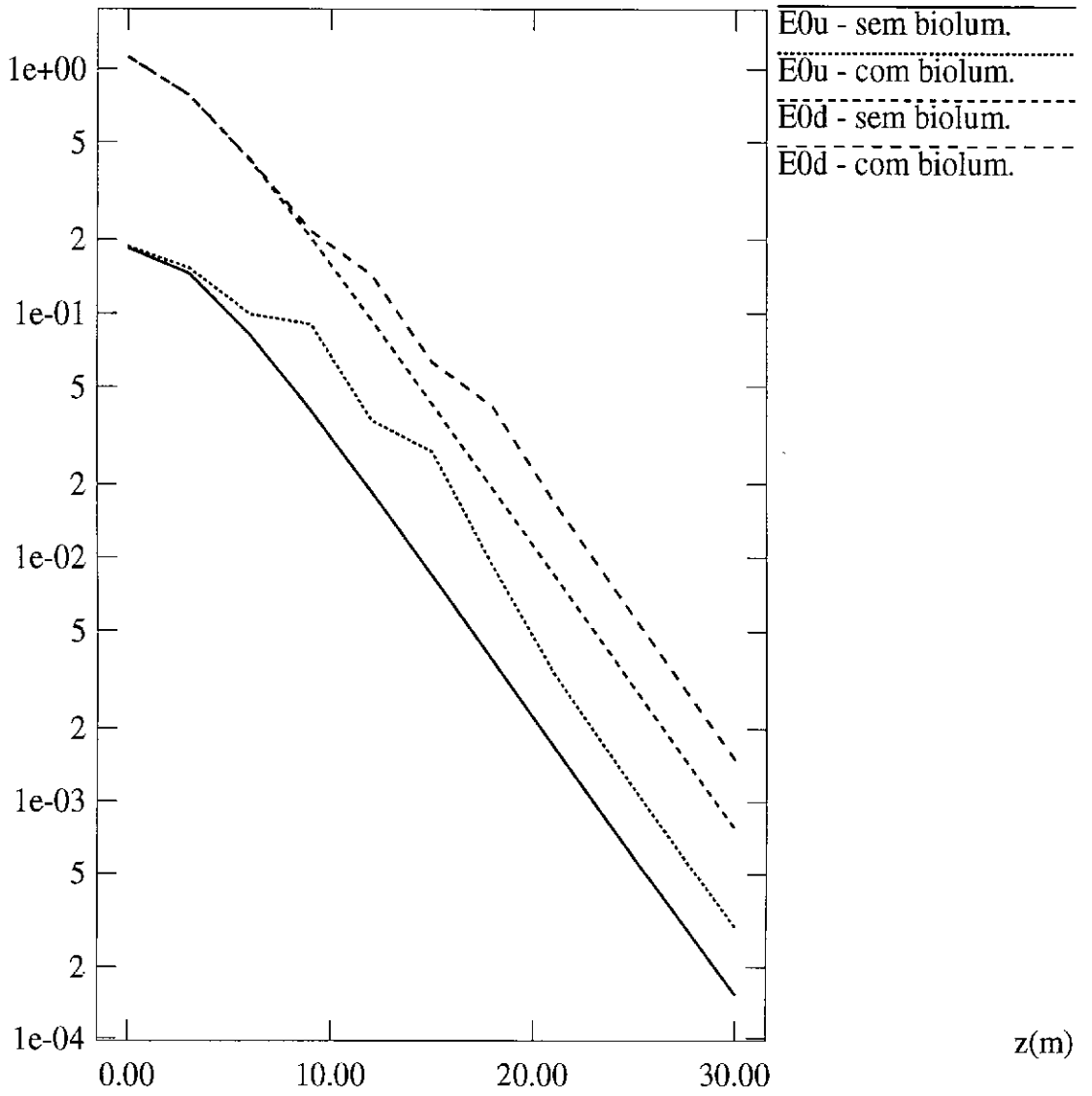


Fig. 4.6 - Influência da bioluminescência no perfil vertical de irradiâncias escalares (caso 1, irradiâncias em escala logarítmica).

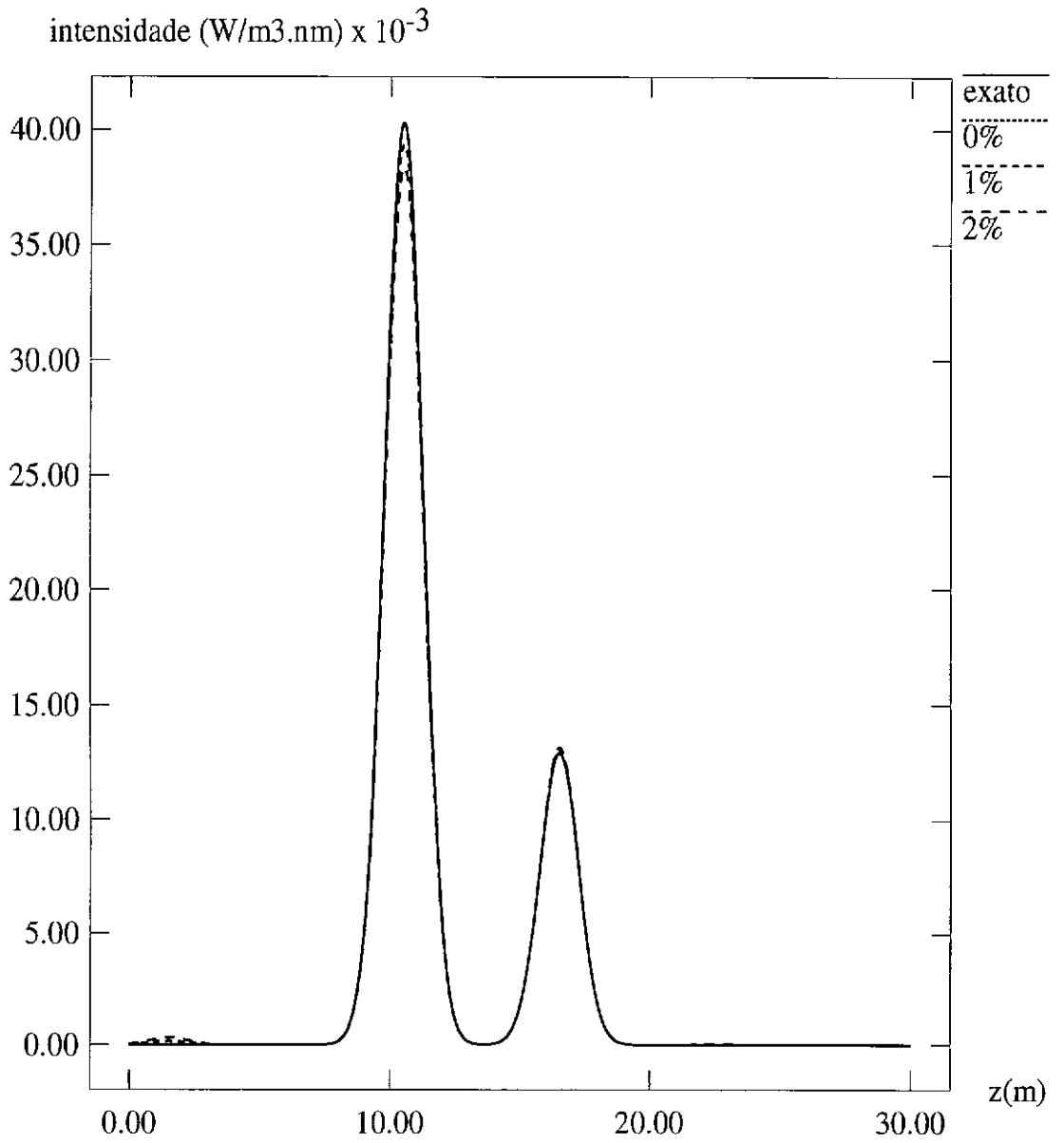


Fig. 4.7 - Influência do ruído para 10 fontes e desvio padrão de 0.75 (caso 1).

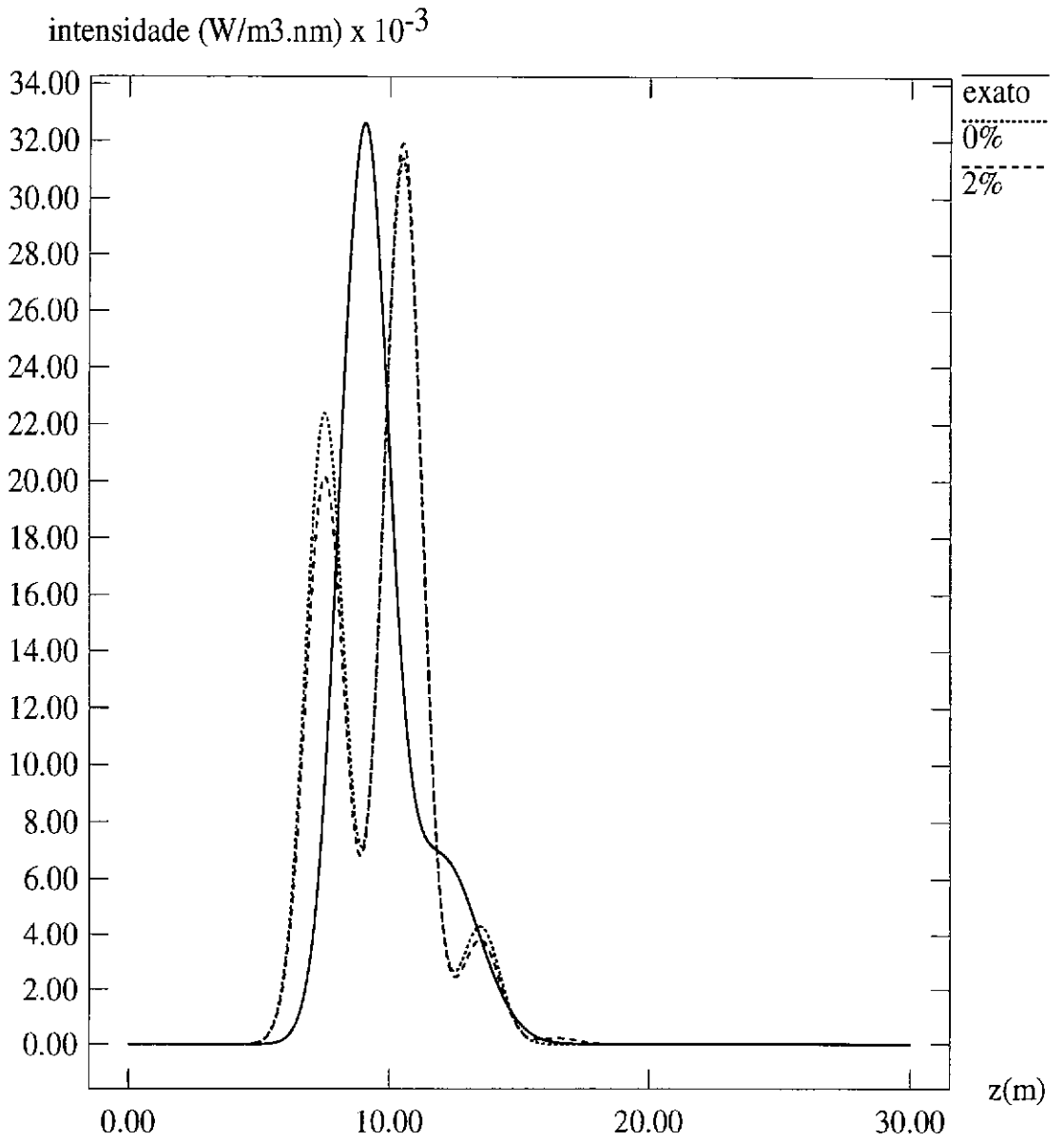


Fig. 4.8 - Influência do ruído para 10 fontes e desvio padrão de 0.75 (caso 2).

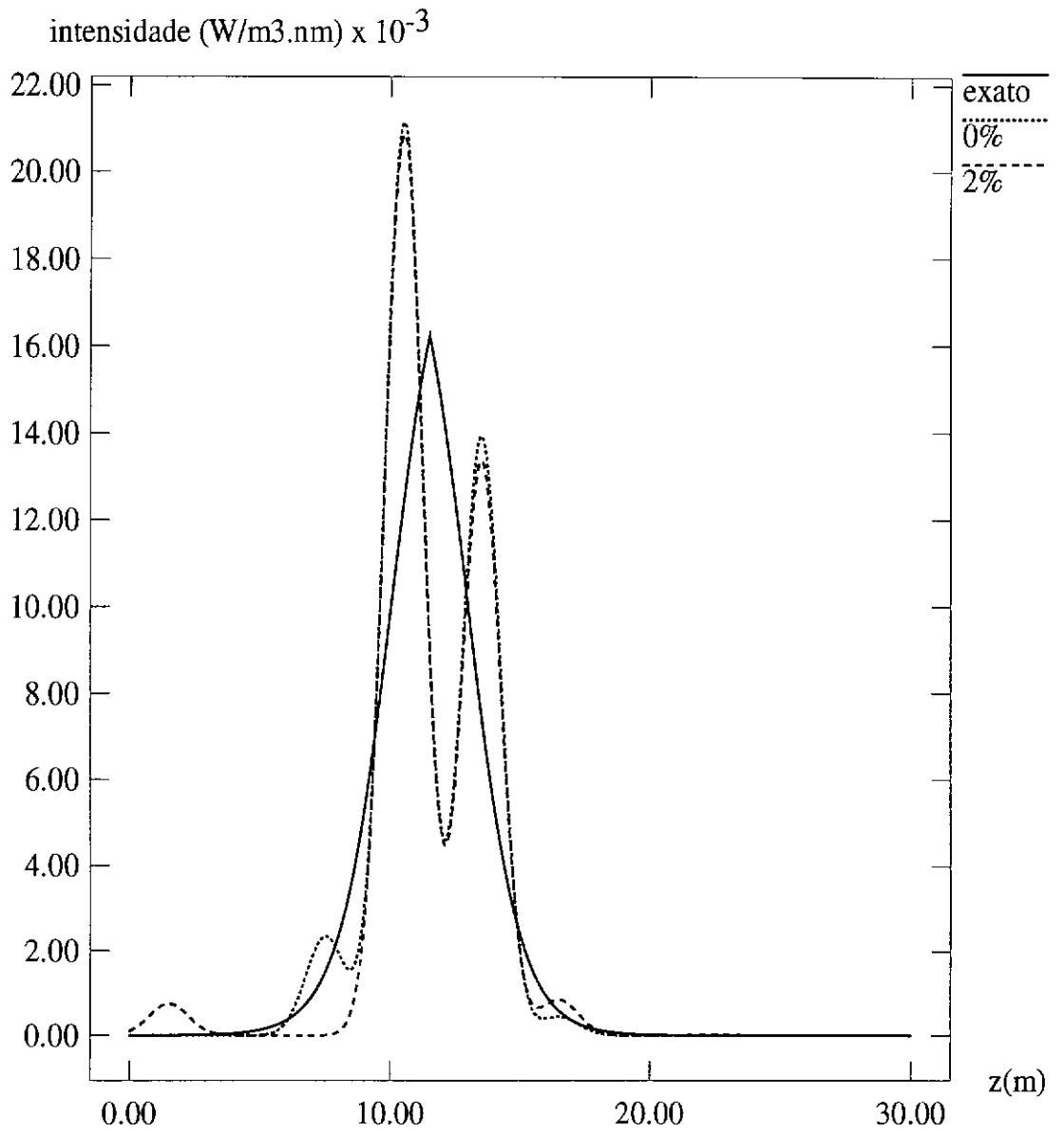


Fig. 4.9 - Influência do ruído para 10 fontes e desvio padrão de 0.75 (caso 3).

valor normalizado

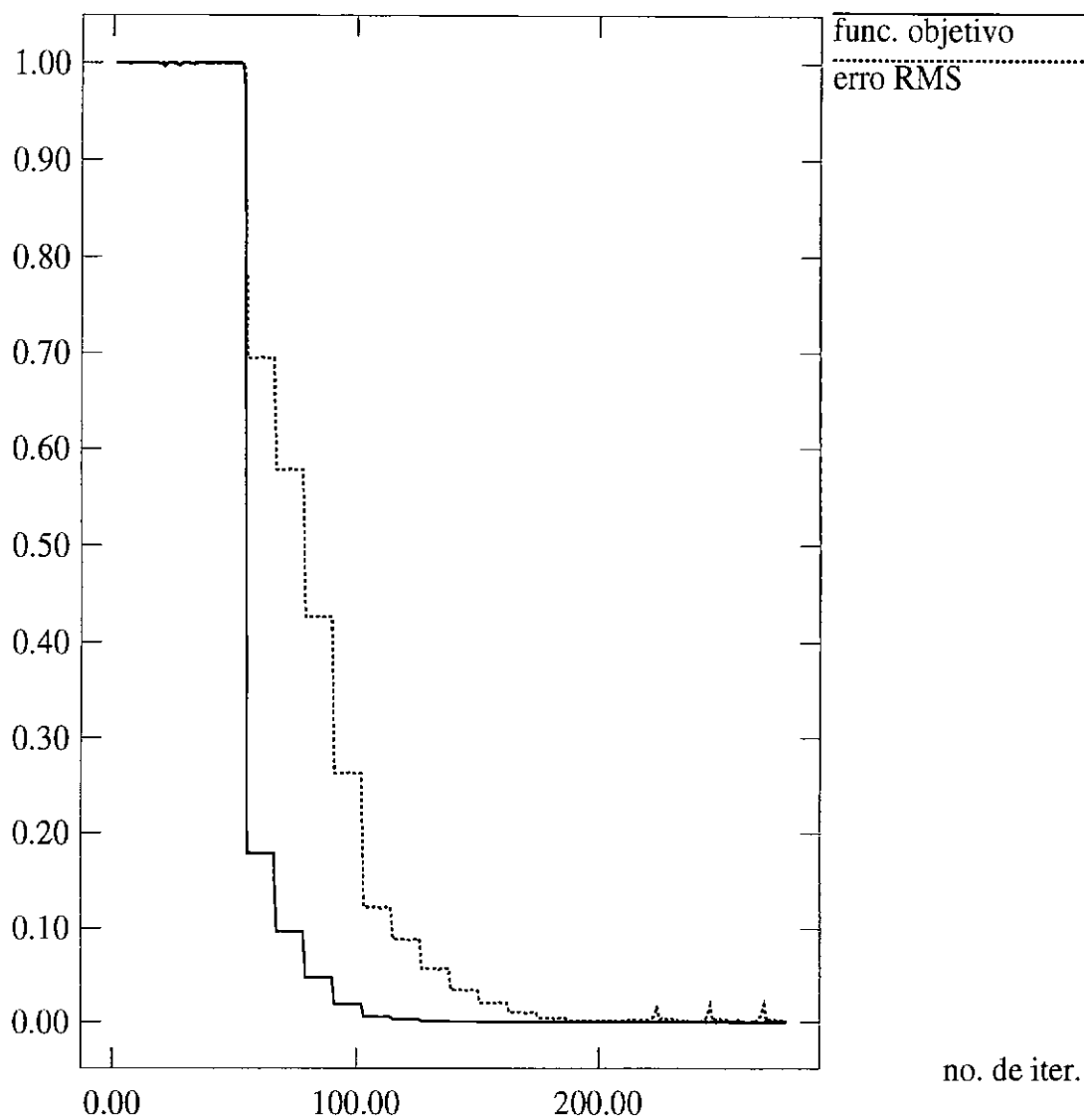


Fig. 4.10 - Decaimento dos valores da função objetivo e do erro RMS em função do número de iterações no caso 1 (10 fontes, desvio padrão de 0.75, sem ruído).

valor normalizado

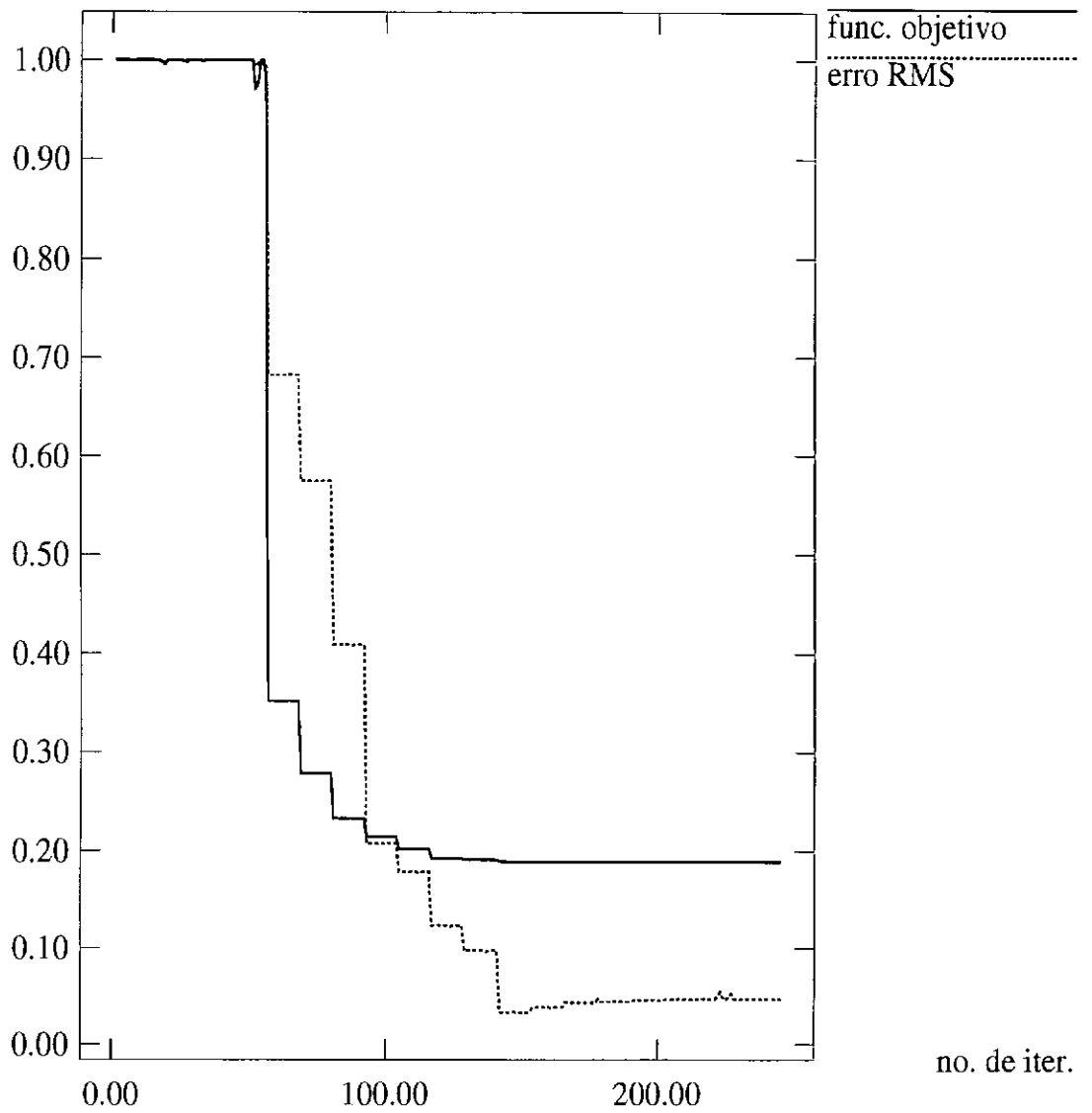


Fig. 4.11 - Decaimento dos valores da função objetivo e do erro RMS em função do número de iterações no caso 2 (10 fontes, desvio padrão de 0.75, com ruído de 2%).

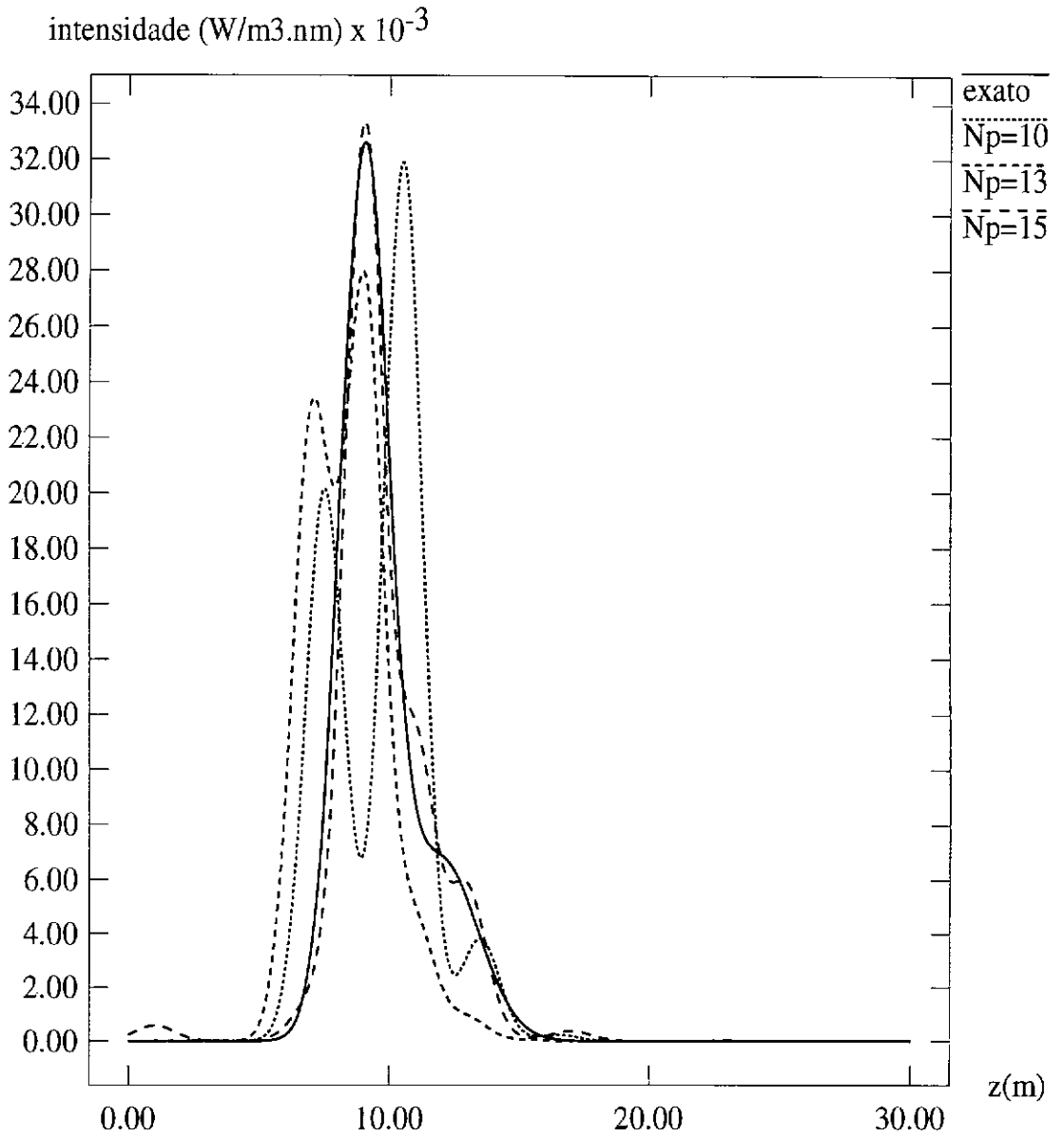


Fig. 4.12 - Influência do número de fontes (N_p), para ruído de 2% e desvio padrão de 0.75 (caso 2).

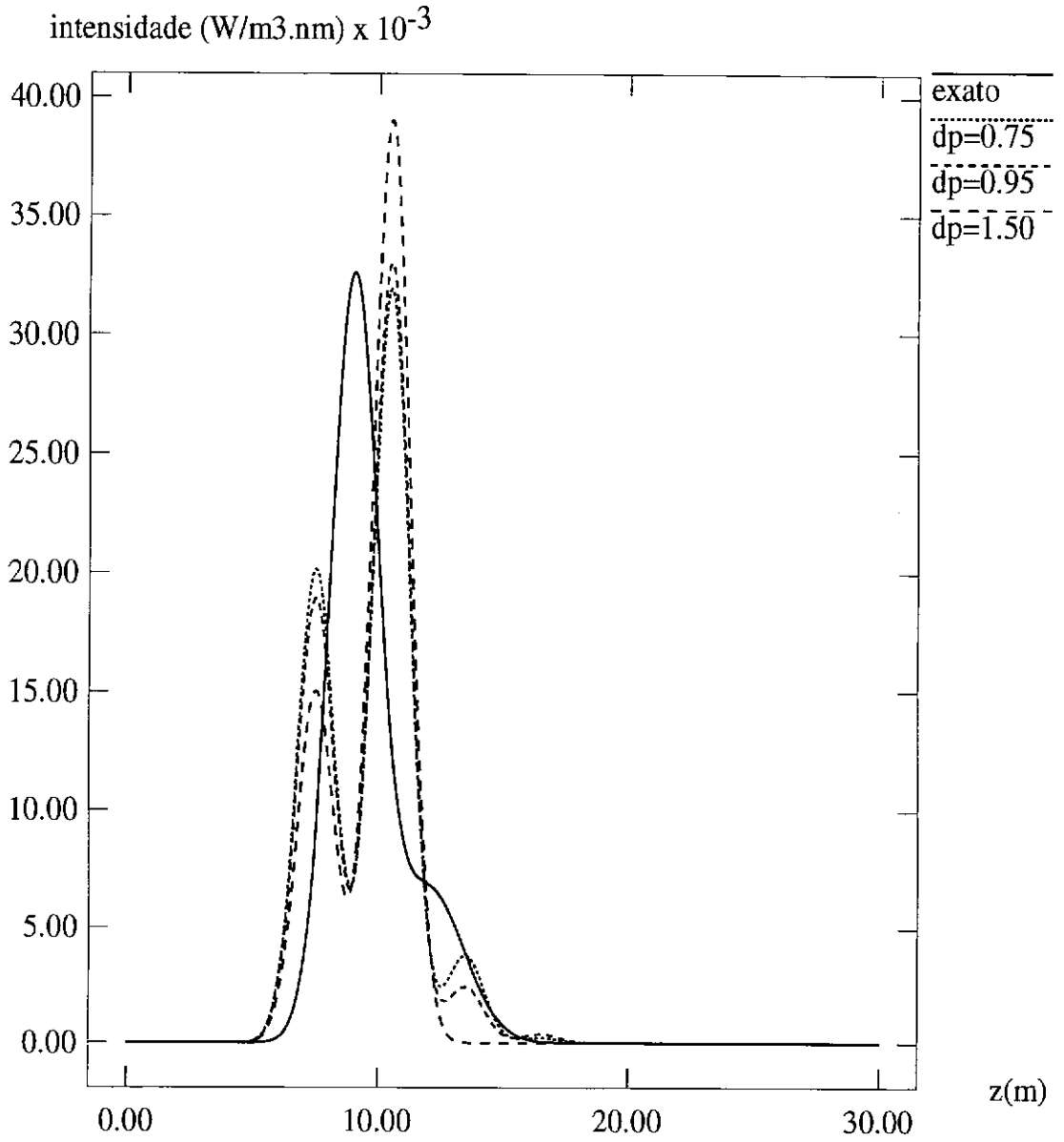


Fig. 4.13 - Influência do desvio padrão (dp), para ruído de 2% e 10 fontes (caso 2).

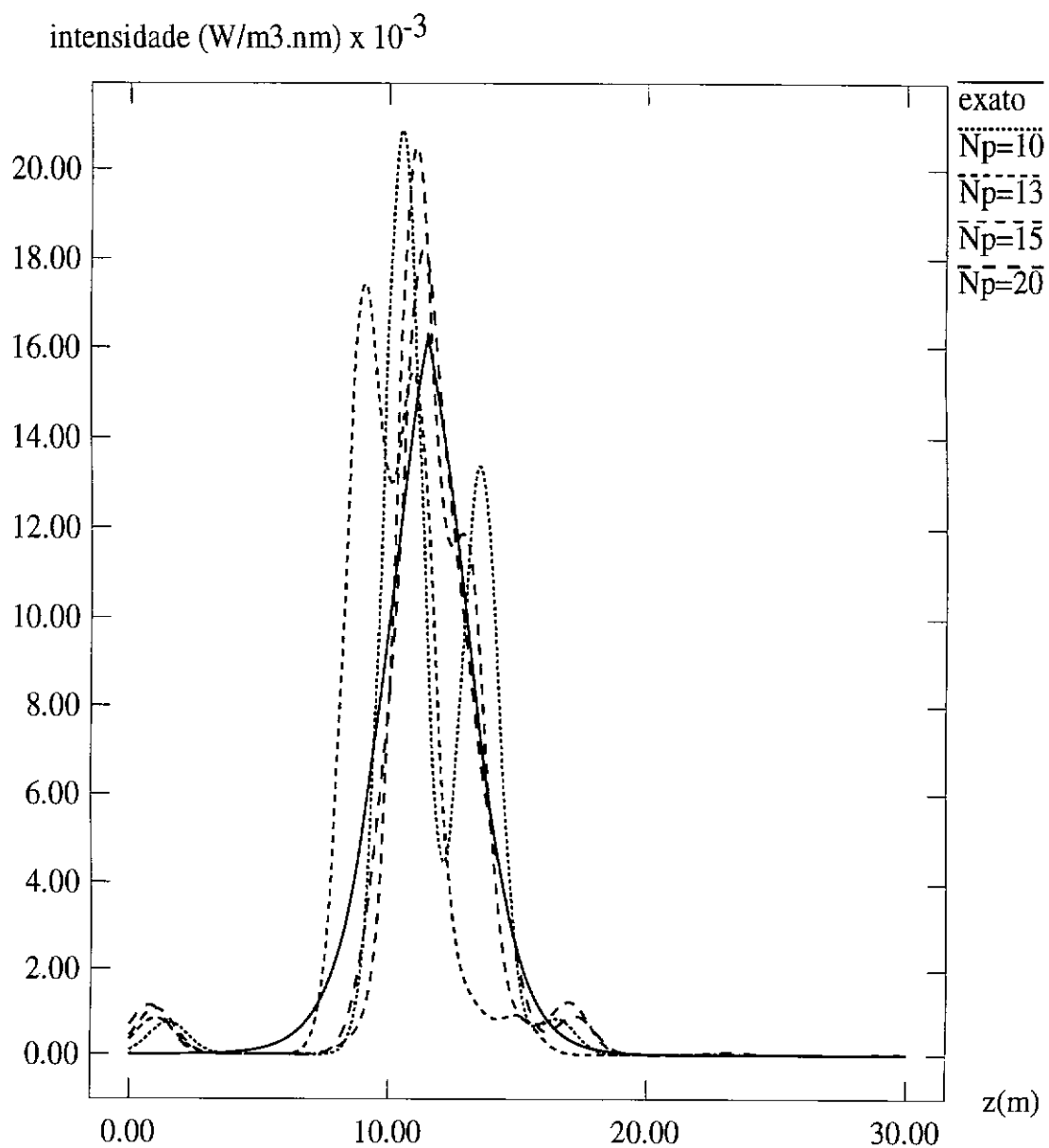


Fig. 4.14 - Influência do número de fontes (\bar{N}_p), para ruído de 2% e desvio padrão de 0.75 (caso 3).

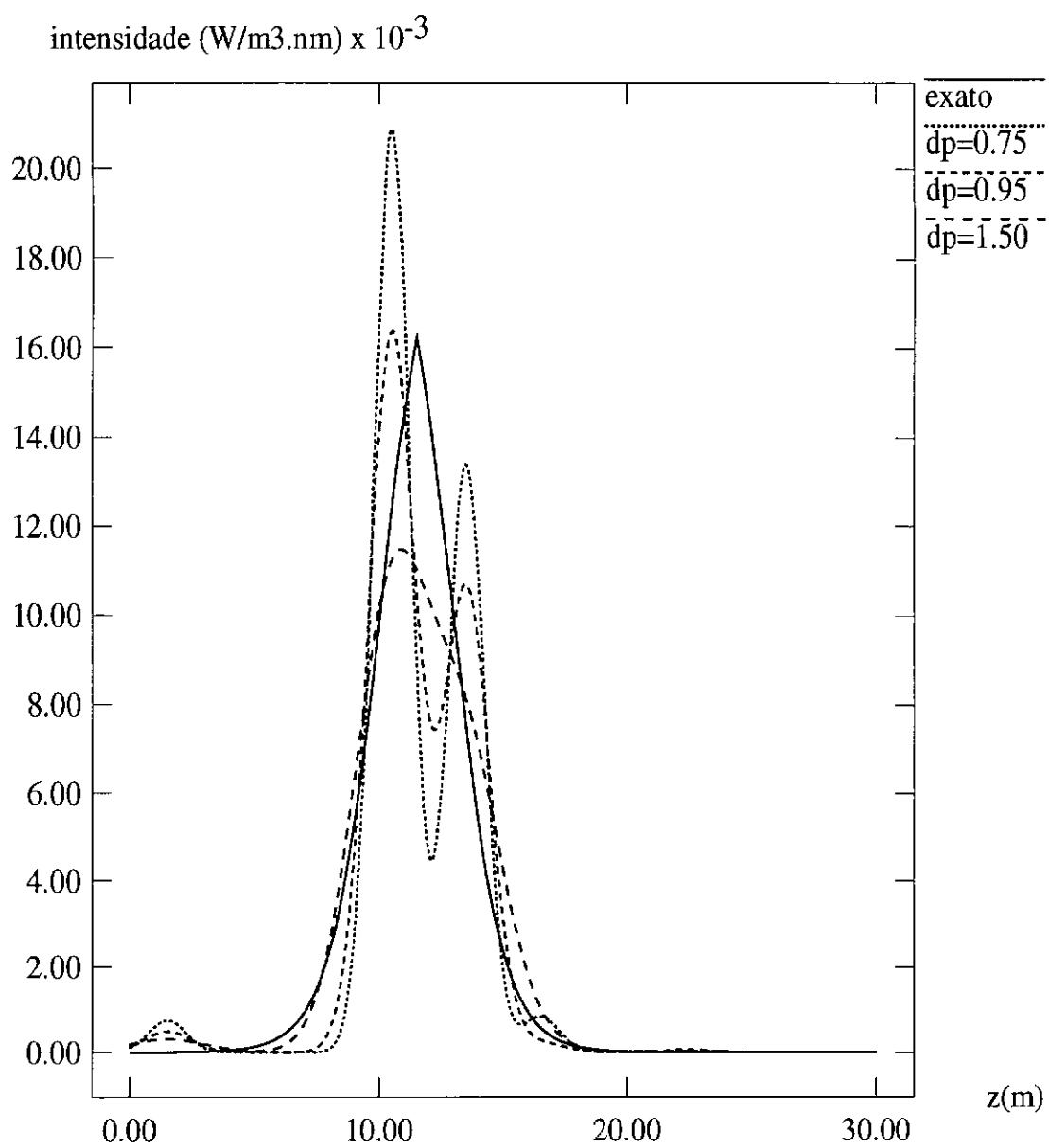


Fig. 4.15 - Influência do desvio padrão (dp), para ruído de 2% e 10 fontes (caso 3).

CAPÍTULO 5

ESTIMAÇÃO DE PROPRIEDADES ÓTICAS INERENTES

5.1 Casos Abordados

Neste trabalho, estimaram-se as seguintes propriedades óticas inerentes: o coeficiente de absorção a e o coeficiente de espalhamento b . Os dados observados são constituídos pelas irradiâncias sintéticas, numa metodologia de inversão semelhante à utilizada no capítulo IV. Conforme o caso abordado, para cada coeficiente considerado, estimou-se um *valor único*, que corresponderia a um “valor médio” ou então um *perfil vertical*. Para perfis verticais, o conjunto de parâmetros a serem estimados (\mathbf{p}), é composto pelos valores discretos do coeficiente (a_k ou b_k) em profundidades igualmente espaçadas, que permitem aproximar o correspondente *perfil vertical exato* ($a(z)$ ou $b(z)$).

Inicialmente, como mostrado na Seção 5.5.1, estimaram-se conjuntamente valores únicos de a e b ($N_p = 2$) e o perfil de bioluminescência ($N_p = 10$), com bons resultados (55). Em seguida, estudaram-se separadamente as metodologias de inversão para perfis verticais de absorção e espalhamento, uma vez que estas poderiam eventualmente diferir, e obtiveram-se também resultados satisfatórios. Finalmente, procedeu-se à estimação *conjunta* desses perfis.

Tao, McCormick e Sanchez (58), haviam proposto um algoritmo para a estimação conjunta e *simultânea* de perfis constantes $a(z)$, $b(z)$ e do perfil de bioluminescência, para dados sem ruído e não obtiveram bons resultados. No presente trabalho, ao se tentar, inicialmente, estimar conjunta e *simultaneamente* os perfis $a(z)$ e $b(z)$, não se obteve sucesso, mesmo para dados sem ruído, adotando-se a metodologia proposta de estimar *alternadamente* esses perfis. Essa estratégia deu bons resultados para perfis constantes (Seção 5.5.2), mesmo para dados com ruído, incluindo também a reconstrução do perfil de bioluminescência.

Analogamente ao capítulo anterior, os dados sintéticos utilizados são referentes às águas da baía de Monterey, EUA, sob luz solar e sem vento, e foram gerados pelo mesmo modelo analítico direto utilizado na inversão (software Hydro-light 3.0). Esses dados são constituídos pelas irradiâncias E_u , E_d , E_{0u} e E_{0d} , para $\lambda = 550 \text{ nm}$, correspondentes a grade vertical de 11 profundidades igualmente espaçadas, variando de 0 a 30 metros. Na geração destes dados, utilizou-se a função de fase de Henyey-Greenstein de um só termo (OTHG), a água foi suposta como sendo infinitamente profunda e a luz solar, uniformemente distribuída com irradiância escalar descendente $E_{0d} = 1 \text{ Wm}^{-2}\text{nm}^{-1}$ na superfície da água. A única diferença, em relação aos dados sintéticos utilizados no capítulo anterior, refere-se à ausência de bioluminescência na maioria dos casos.

Como se conhecia a solução exata (\mathbf{p}^e), foi possível avaliar a qualidade da solução obtida através do valor do erro RMS (*root mean square*). Adota-se, neste capítulo, o erro RMS *normalizado*, definido a partir do vetor de parâmetros na iteração final ($\mathbf{p}^{(f)}$) e na iteração inicial ($\mathbf{p}^{(0)}$), e do vetor correspondente à solução exata ($\mathbf{p}^{(e)}$):

$$\epsilon = \left[\sum_{i=1}^{N_p} (p_i^{(f)} - p_i^{(e)})^2 / (p_i^{(0)} - p_i^{(e)})^2 \right]^{1/2}. \quad (5.1)$$

Na avaliação dos resultados, utiliza-se também o valor final (correspondente a $\mathbf{p}^{(f)}$) de $R(\mathbf{p})$, *normalizado*, em relação ao seu valor inicial (correspondente a $\mathbf{p}^{(0)}$):

$$\rho = R(\mathbf{p}^{(f)}) / R(\mathbf{p}^{(0)}). \quad (5.2)$$

Com o intuito de melhorar a apresentação da metodologia e dos resultados, optou-se por descrever primeiramente as estimações dos perfis de absorção (Seção 5.2) e de espalhamento (Seção 5.3), cujos resultados são comentados na Seção 5.4. Em seguida, descreve-se a estimativa conjunta de valores únicos de a e b e do perfil de bioluminescência (Seção 5.5.1) e de perfis $a(z)$ e $b(z)$ sem e com bioluminescência (Seções 5.5.2 e 5.5.3).

5.2 Estimativa de Perfis de Absorção

Expõe-se a seguir a estimativa de perfis verticais do coeficiente de absorção ($a(z)$). Os dados sintéticos foram gerados pelo código Hydrolight 3.0 para as condições citadas na seção anterior, *sem* bioluminescência, e considerando-se dois perfis $a(z)$, a serem reconstruídos:

- perfil constante 0.125 m^{-1} ;
- perfil variável, composto por um valor constante (0.125 m^{-1}) acrescido de uma gaussiana, que atinge seu valor máximo (0.155 m^{-1} , total) em $z = 12 \text{ m}$;

No procedimento de inversão, representa-se o perfil de a por um conjunto discreto de $n = 11$ pontos igualmente espaçados, sendo o primeiro e o último correspondentes, respectivamente, à superfície ($z = 0 \text{ m}$) e ao nível mais profundo ($z = 30 \text{ m}$). Assim, deseja-se estimar:

$$a_k \quad (k = 1, 2, \dots, 11)$$

Seguem-se os limites impostos, que abrangem quase toda a faixa de a relativa a águas costeiras e estuarinas e a estimativa inicial $a_k^{(0)}$:

$$0.00 \leq a_k \leq 0.50 \text{ m}^{-1} \quad \text{e} \quad a_k^{(0)} = 0.25 \text{ m}^{-1} \quad (k = 1, 2, \dots, 11)$$

Nas comparações efetuadas analisa-se a influência do fator de correção relativo à profundidade, conforme exposto nas seções 3.3.2 e 3.3.3, ou da regularização, conforme seções 3.3.2 e 3.3.3. Utilizou-se sempre regularização por máxima entropia, variando-se o critério de escolha do parâmetro de regularização (γ). Adota-se a seguinte convenção para os fatores de correção:

- *EXP* - o fator $\sqrt{e^Z}$ (Equação 3.5);
- *BBL* - o fator baseado na lei de Beer-Bouguer-Lambert (Equação 3.6);

e para critério de escolha de γ :

- *TE* - tentativa-e-erro;
- *ST* - critério de Sena e Toksöz (Equação 3.15).

Descrevem-se a seguir alguns dos vários casos abordados e os correspondentes valores finais *normalizados* da diferença quadrática (ρ) e do erro RMS (ϵ), conforme definidos, respectivamente, nas Equações 5.2 e 5.1.

- 1) **Influência do fator de correção relativo à profundidade *EXP* - dados sem ruído.** Estimou-se o perfil constante $a = 0.125 \text{ m}^{-1}$, sem nenhum fator, o que levou a erros nas profundidades maiores (acima de 20 *m*, neste caso). Verifica-se que o uso do fator *EXP* ($\sqrt{e^Z}$) corrige estes erros e leva a uma solução muito próxima da exata (Figura 5.1). Na Tabela 5.1, verificam-se os valores muito menores obtidos para ρ e ϵ quando se utiliza esse fator de correção.
- 2) **Influência da regularização para perfil constante - dados com 2% de ruído.** Para o mesmo perfil constante $a = 0.125 \text{ m}^{-1}$ e utilizando-se também o fator de correção $\sqrt{e^Z}$, observa-se a solução totalmente errada quando não se utiliza regularização (Figura 5.2). Neste caso, os valores de ρ e ϵ foram maiores do que com regularização (Tabela 5.2). Nota-se também que, utilizando-se regularização por máxima entropia, o critério *ST* levou a uma solução muito próxima da exata, apesar da solução obtida pelo critério *TE* (com $\gamma = 2.50$) ser boa (Figura 5.3). Constata-se a necessidade de regularização e que, neste caso de perfil constante, o critério *ST* é mais eficiente, o que pode ser atestado pelo correspondente valor de ϵ , que é o menor (embora *ST* não apresente o menor ρ).
- 3) **Comparação entre os fatores *EXP* e *BBL* para perfil gaussiano - dados sem ruído.** No caso de um perfil gaussiano $a(z)$, constata-se novamente a necessidade de se utilizar um fator de correção para corrigir os a_k correspondentes às profundidades maiores (Tabela 5.3 e Figura 5.4). Obtiveram-se bons resultados tanto com o fator *EXP* como com o fator *BBL*, proposto neste trabalho, sendo que o primeiro apresentou uma solução ligeiramente melhor (Tabela 5.3 e Figura 5.5).
- 4) **Influência da regularização *TE* para perfil variável - dados com 2% de ruído.** Para o mesmo perfil gaussiano e utilizando-se o fator de correção $\sqrt{e^Z}$ tem-se uma solução com oscilações quando não se utiliza regularização. Obtém-se soluções com boa precisão quando se utiliza regularização por máxima entropia pelo critério *TE* (Tabela 5.4 e Figura 5.6). A escolha do valor $\gamma = 5.00$ para o parâmetro de regularização levou à melhor solução,

apesar de a solução com $\gamma = 0.50$ ser aceitável (Figura 5.7). É interessante notar que isso é expresso pelos valores de ϵ , mas não pelos de ρ , o que dá uma idéia das dificuldades em se escolher a melhor solução no caso de dados experimentais (ϵ não disponível).

- 5) **Influência da regularização ST para perfil variável - dados com 2% de ruído.** Ainda para o mesmo perfil gaussiano e o mesmo fator de correção $\sqrt{e^Z}$, a regularização com o uso do critério ST levou a uma solução muito ruim, com instabilidades (oscilações bruscas), como mostrado na Tabela 5.5 e Figura 5.8. Modificou-se a Equação 3.15, compondo-se um critério híbrido no qual o próprio parâmetro de regularização ST é ponderado por um novo coeficiente λ , conforme abaixo:

$$J(\mathbf{p}) = R(\mathbf{p}) [1 - \lambda (S(\mathbf{p})/S_{\max})]$$

Adotando-se, para o mesmo caso, os valores $\lambda = 0.10$ e $\lambda = 0.90$, obtiveram-se resultados bem melhores, semelhantes entre si, sendo que as instabilidades foram “atenuadas”. (Tabela 5.5 e Figura 5.8). Na Figura 5.9 compara-se a solução obtida por ST e $\lambda = 0.90$ com aquela obtida por TE e $\gamma = 5.00$.

- 6) **Regularização ST para perfil variável sem uso de fator de correção relativo à profundidade - dados com 2% de ruído.** Para o mesmo perfil gaussiano, testou-se o critério ST , sem o peso λ , o que levou a uma solução “achatada”, que corresponde ao valor constante ≈ 0.125 (Tabela 5.6 e Figura 5.10). O uso de $\lambda = 0.10$ e $\lambda = 0.90$ produziu soluções melhores, mas aceitáveis somente para profundidades menores.

Seguem-se, nas páginas seguintes, as sequências de **tabelas e figuras** relativas aos casos enumerados acima.

TABELA 5.1 - PERFIL CONSTANTE DE ABSORÇÃO SEM RUÍDO: INFLUÊNCIA DO FATOR DE CORREÇÃO RELATIVO À PROFUNDIDADE *EXP*.

caso analisado	ρ	ϵ
sem fator <i>EXP</i>	0.3007409×10^{-5}	0.3932765
com fator <i>EXP</i>	0.3875269×10^{-7}	0.3619776×10^{-3}

TABELA 5.2 - PERFIL CONSTANTE DE ABSORÇÃO COM RUÍDO: INFLUÊNCIA DA REGULARIZAÇÃO POR MÁXIMA ENTROPIA, PELOS CRITÉRIOS DE TENTATIVA-E-ERRO (*TE*) E DE SENA E TOKSÖZ (*ST*), FAZENDO-SE USO DO FATOR *EXP* EM TODOS OS CASOS.

caso analisado	ρ	ϵ
sem regularização	0.0572305	0.5910479
<i>TE</i> , $\gamma = 2.50$	0.3884785×10^{-3}	0.0285921
<i>ST</i>	0.0175664	0.9993670×10^{-3}

TABELA 5.3 - PERFIL VARIÁVEL DE ABSORÇÃO SEM RUÍDO: INFLUÊNCIA DO FATOR DE CORREÇÃO RELATIVO À PROFUNDIDADE E COMPARAÇÃO ENTRE OS FATORES *EXP* E *BBL*.

caso analisado	ρ	ϵ
sem fator	0.1429182×10^{-4}	0.22622580
com fator <i>EXP</i>	0.1056514×10^{-6}	0.6101136×10^{-2}
com fator <i>BBL</i>	0.3106119×10^{-7}	0.8215471×10^{-2}

TABELA 5.4 - PERFIL VARIÁVEL DE ABSORÇÃO COM RUÍDO: INFLUÊNCIA DA REGULARIZAÇÃO POR MÁXIMA ENTROPIA TE , COM O FATOR DE CORREÇÃO EXP .

caso analisado	ρ	ϵ
sem regularização	0.5291442×10^{-3}	0.1379960
$TE, \gamma = 0.50$	0.5462178×10^{-3}	0.0794808
$TE, \gamma = 5.00$	0.6238828×10^{-3}	0.0333318

TABELA 5.5 - PERFIL VARIÁVEL DE ABSORÇÃO COM RUÍDO: INFLUÊNCIA DA REGULARIZAÇÃO POR MÁXIMA ENTROPIA ST , COM O FATOR DE CORREÇÃO EXP .

caso analisado	ρ	ϵ
ST	0.2883101×10^{-2}	0.4499675
$ST, \lambda = 0.10$	0.5861701×10^{-3}	0.1341389
$ST, \lambda = 0.90$	0.5301243×10^{-3}	0.1224635

TABELA 5.6 - PERFIL VARIÁVEL DE ABSORÇÃO COM RUÍDO: INFLUÊNCIA DA REGULARIZAÇÃO POR MÁXIMA ENTROPIA ST , SEM UTILIZAÇÃO DE FATOR DE CORREÇÃO RELATIVO À PROFUNDIDADE.

caso analisado	ρ	ϵ
ST	0.0187150	0.1261023
$ST, \lambda = 0.10$	0.0104572	0.4452645
$ST, \lambda = 0.90$	0.0104556	0.0692011

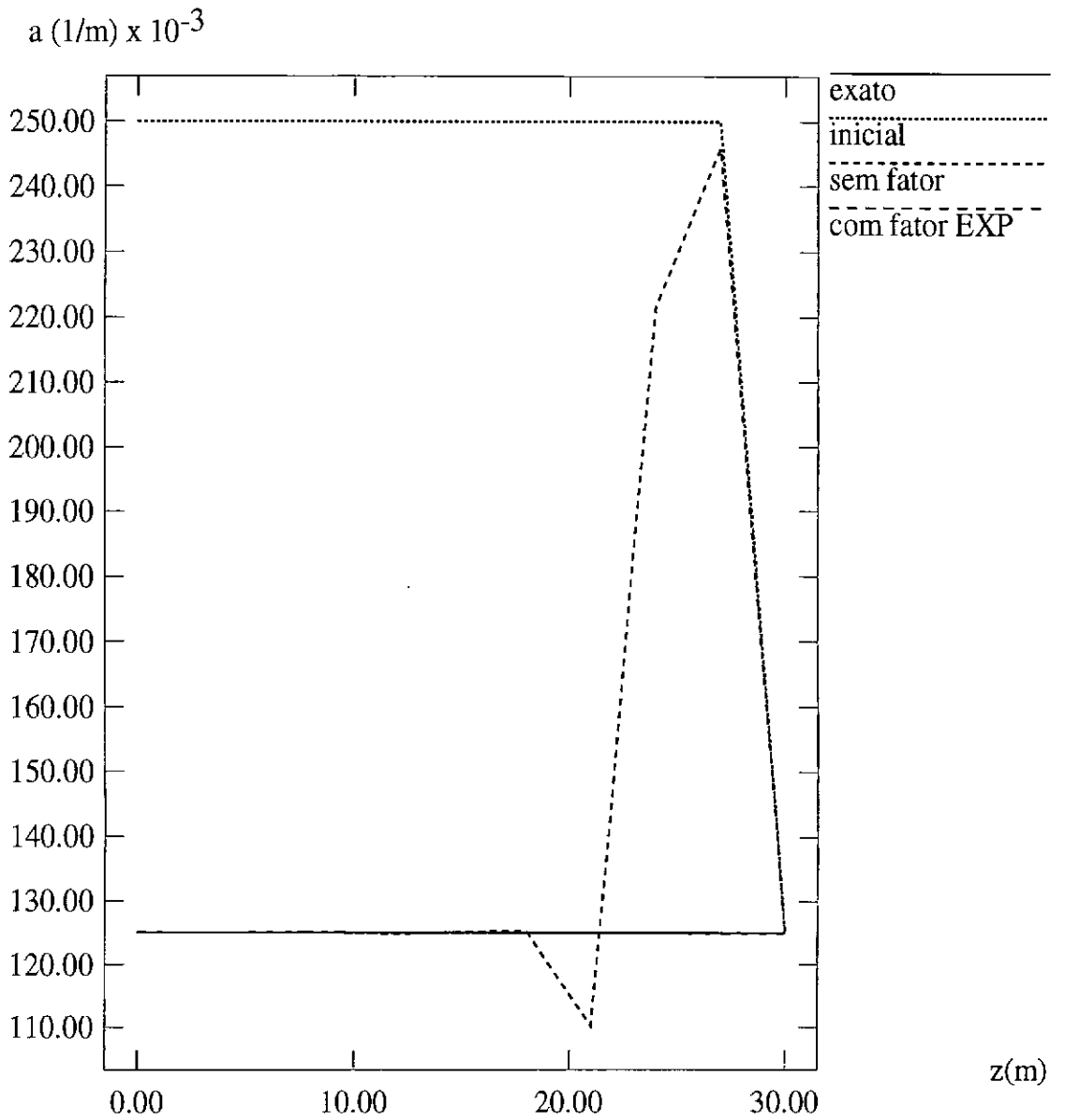


Fig. 5.1 - Perfil constante de absorção sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade *EXP*.

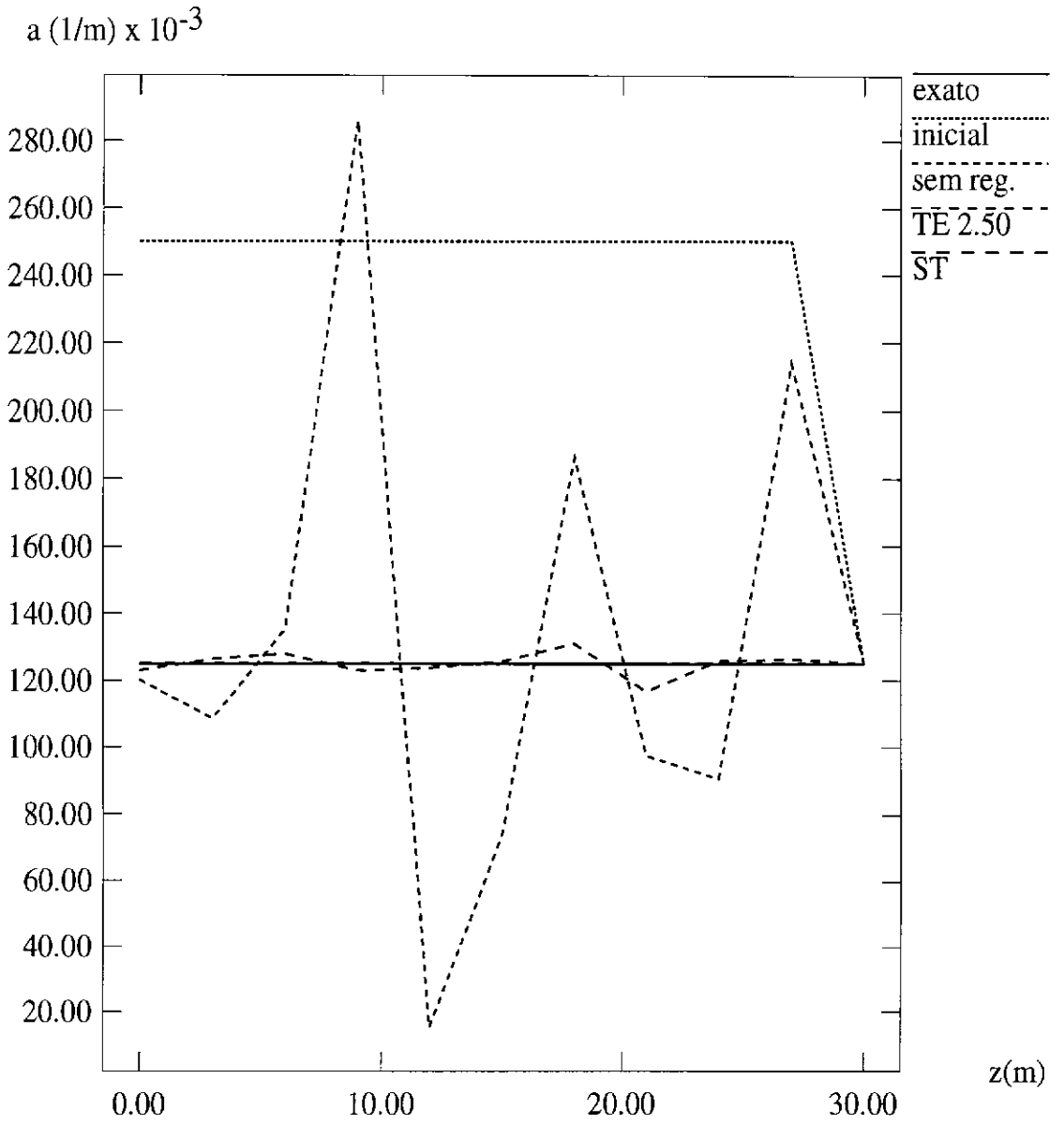


Fig. 5.2 - Perfil constante de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia (com uso do fator *EXP*).

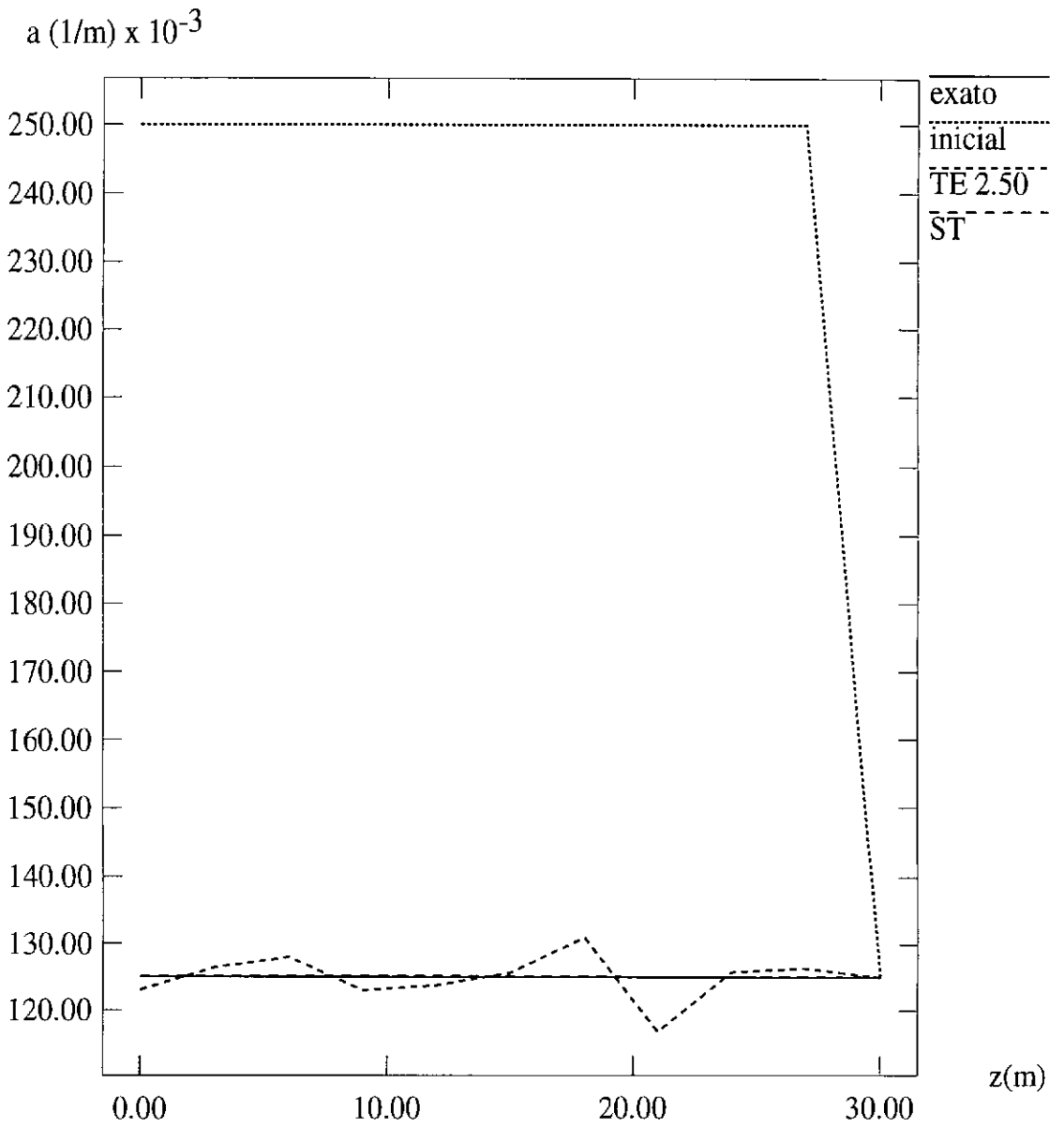


Fig. 5.3 - Perfil constante de absorção com ruído: comparação dos critérios de regularização por máxima entropia (com uso do fator *EXP*).

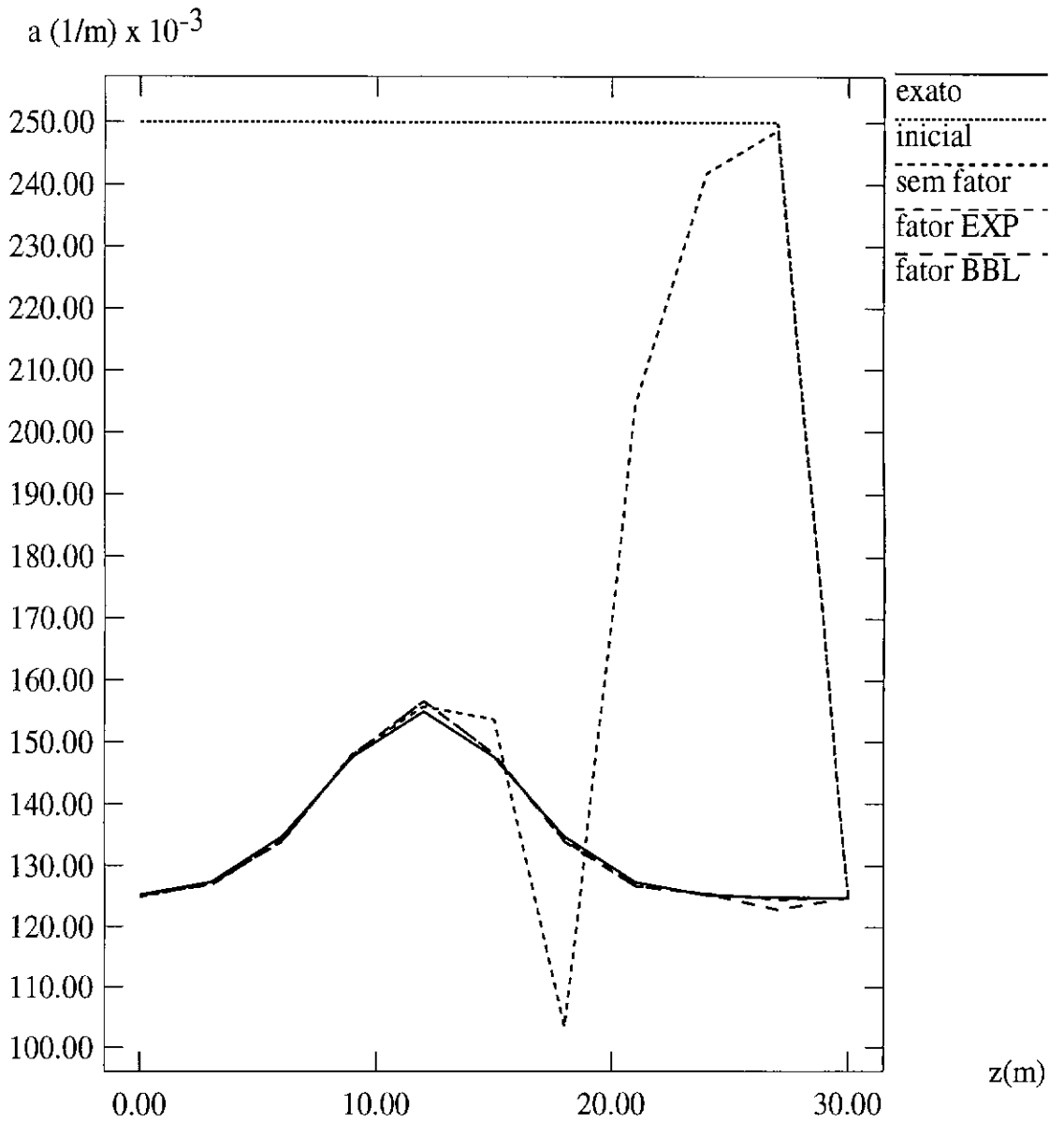


Fig. 5.4 - Perfil variável de absorção sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade.

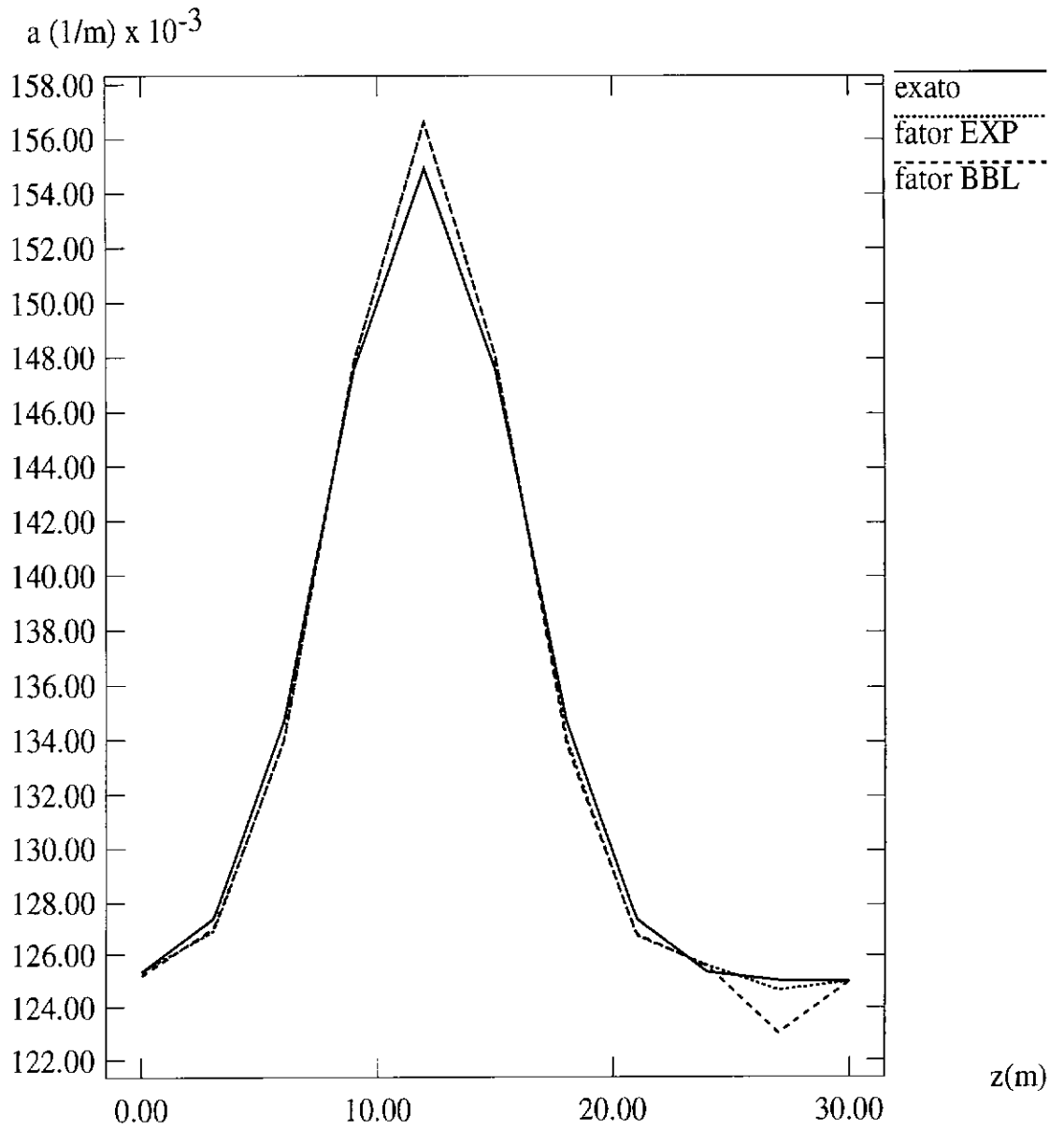


Fig. 5.5 - Perfil variável de absorção sem ruído: comparação entre os fatores *EXP* e *BBL*.

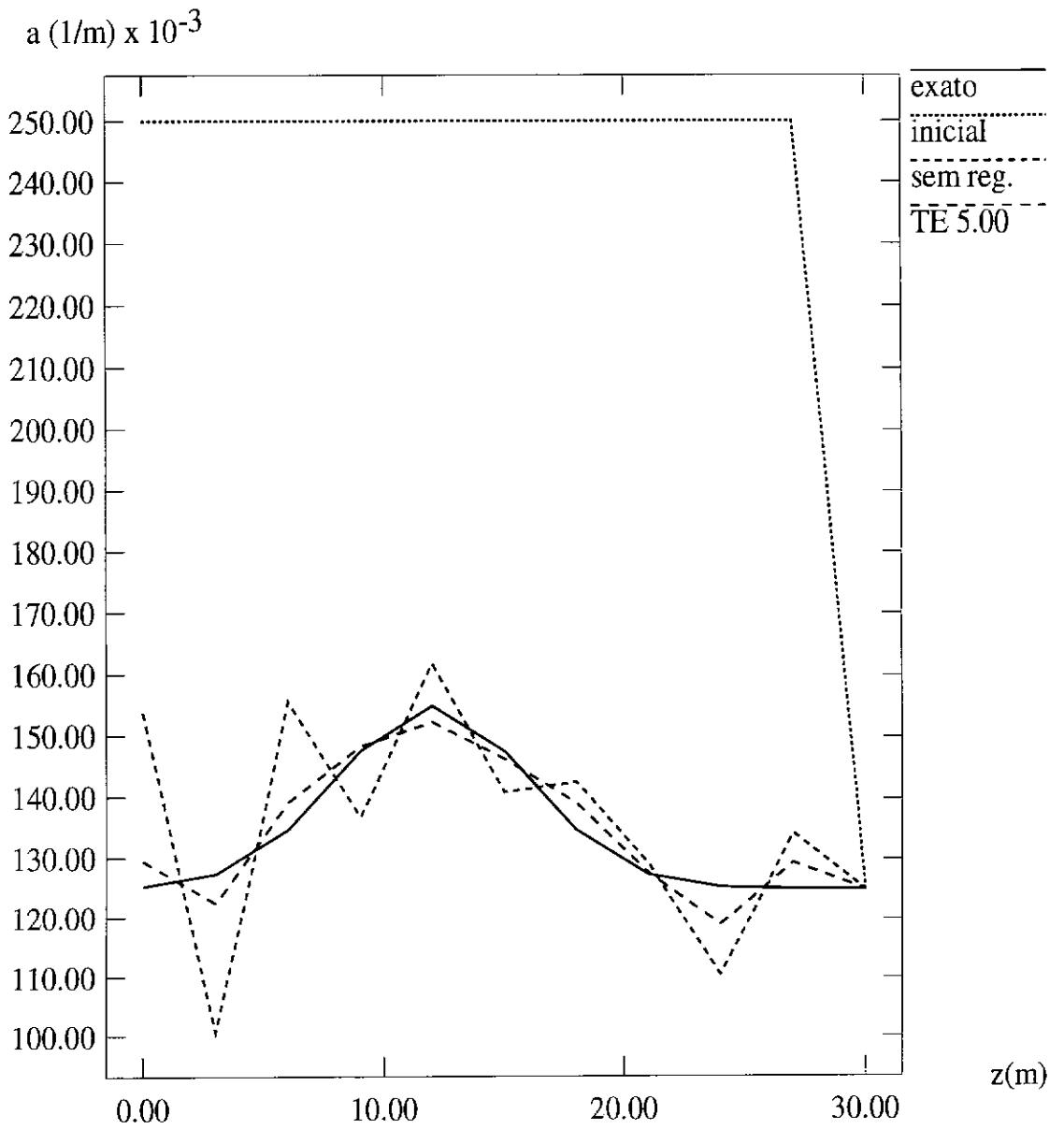


Fig. 5.6 - Perfil variável de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia TE (com uso do fator EXP).

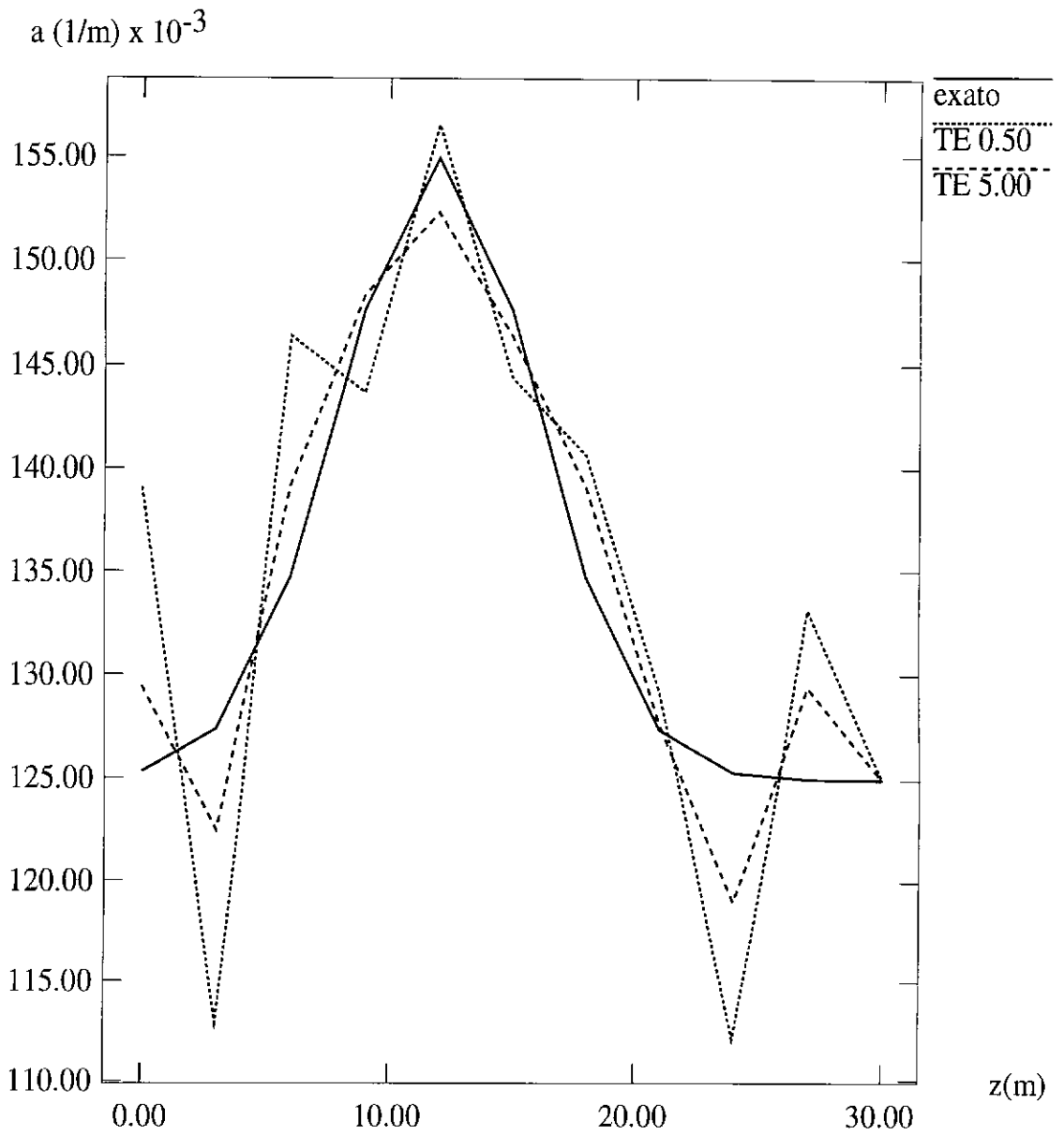


Fig. 5.7 - Perfil variável de absorção com ruído: influência de γ na regularização por máxima entropia pelo critério TE (com uso do fator EXP).

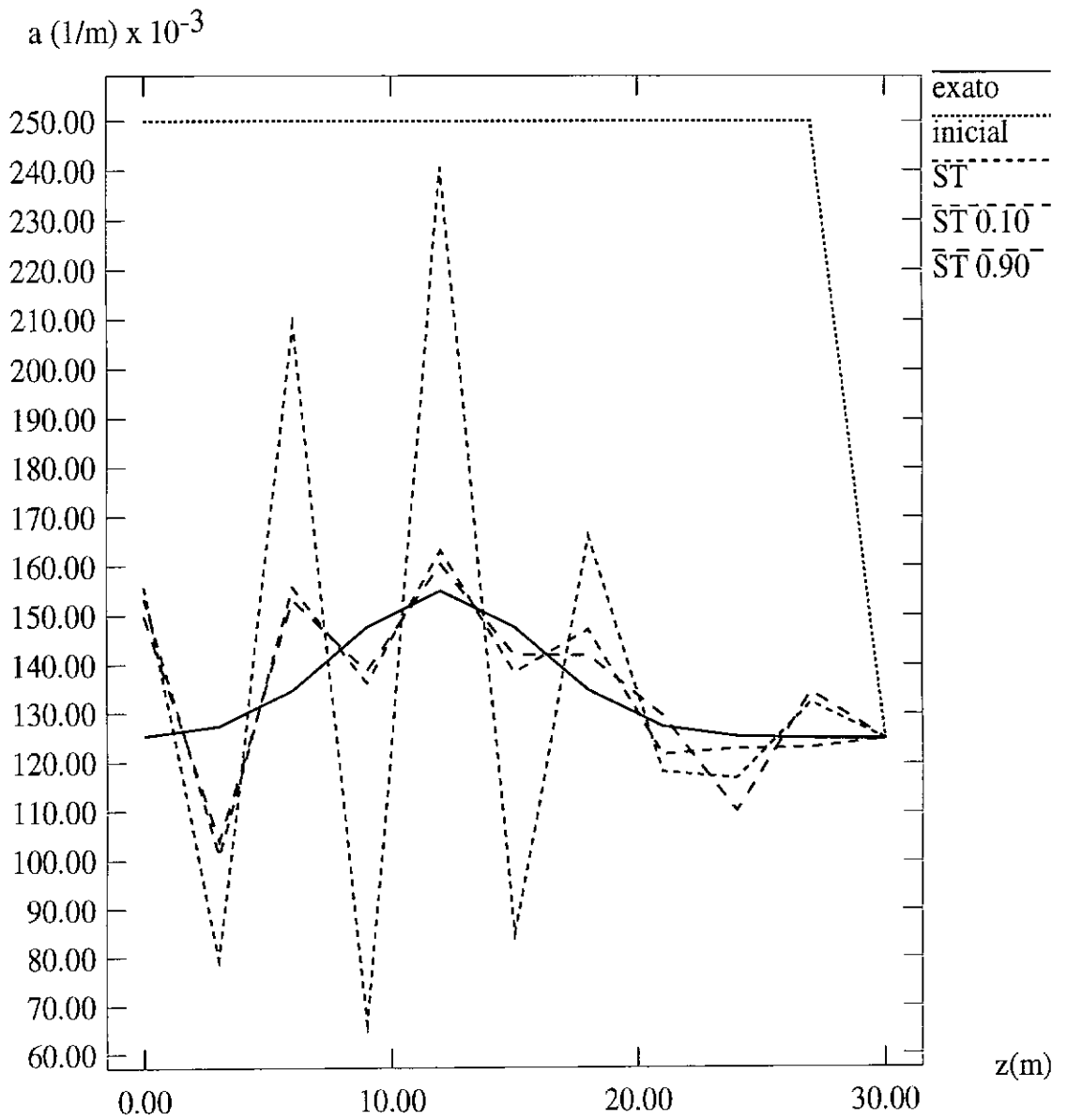


Fig. 5.8 - Perfil variável de absorção com ruído: influência da regularização por máxima entropia ST (com uso do fator EXP).

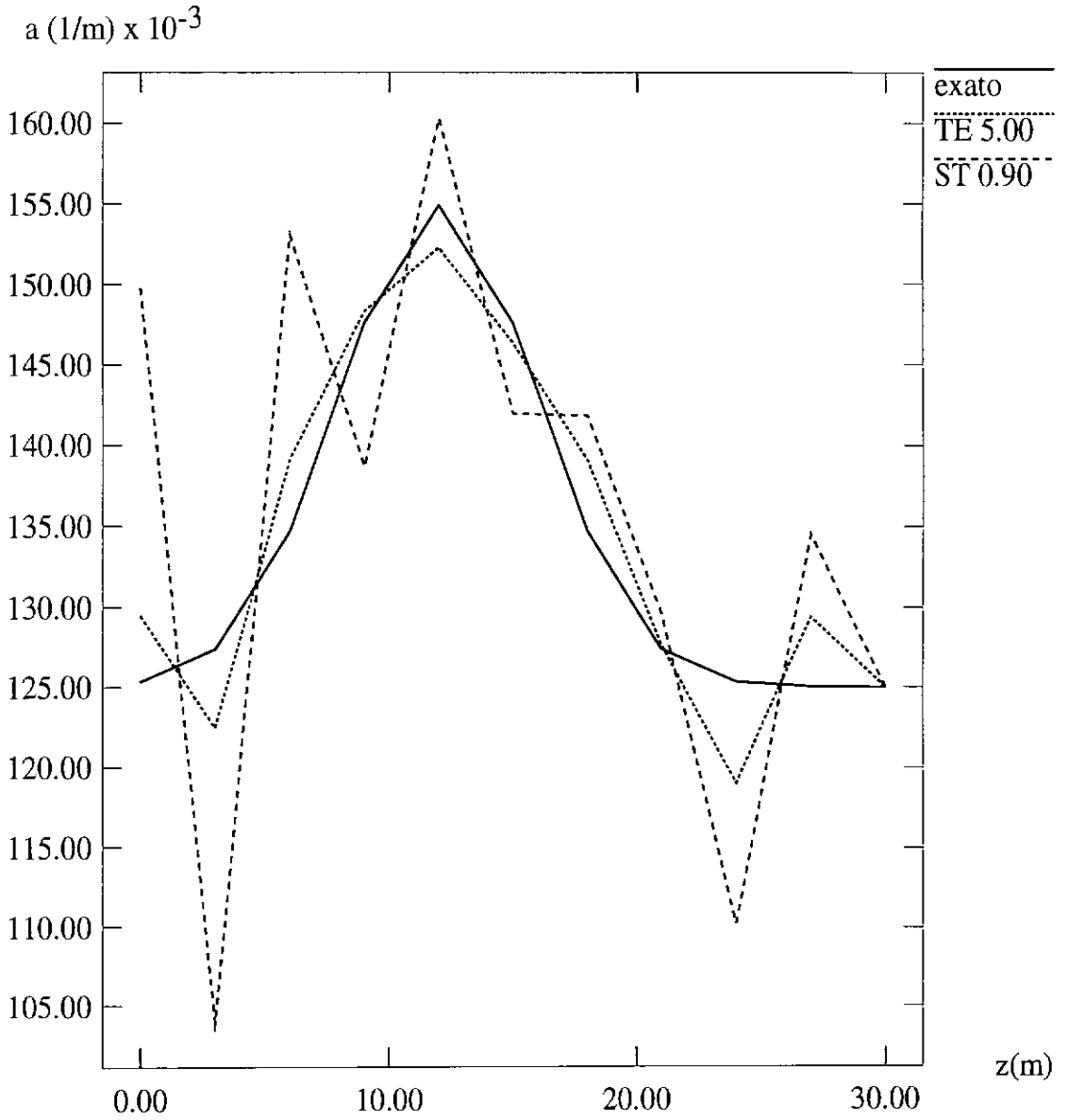


Fig. 5.9 - Perfil variável de absorção com ruído: comparação de critérios de regularização por máxima entropia (com uso do fator *EXP*).

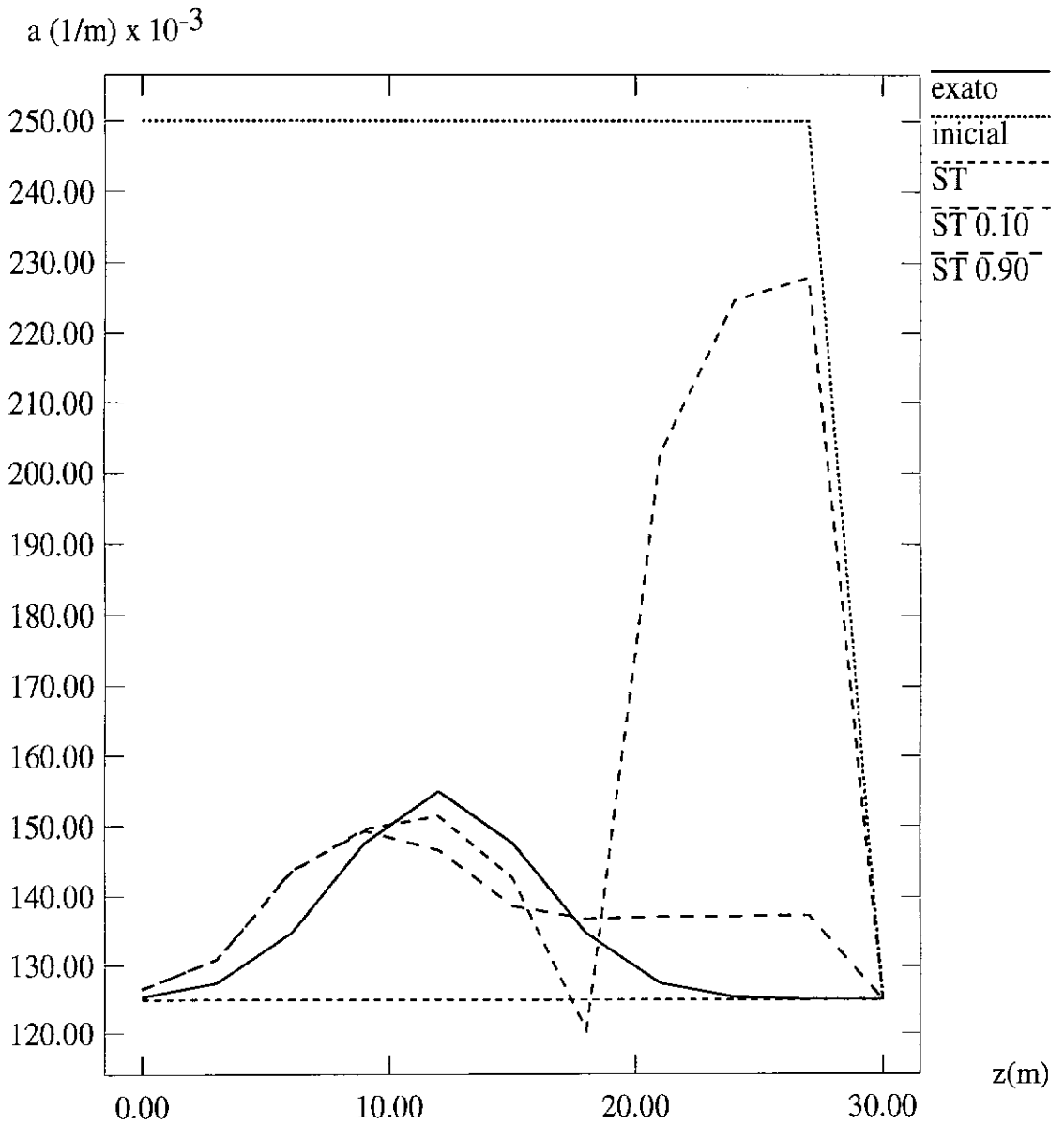


Fig. 5.10 - Perfil variável de absorção com ruído: uso de regularização por máxima entropia ST sem fator de correção relativo à profundidade.

5.3 Estimação de Perfis de Espalhamento

Seguem-se casos de estimação de perfis verticais do coeficiente de espalhamento (b). Os dados sintéticos foram gerados pelo código Hydrolight 3.0 para as condições citadas na Seção 5.1, *sem* bioluminescência, e considerando-se dois perfis de b , a serem reconstruídos:

- perfil constante 1.205 m^{-1} ;
- perfil variável, composto por um valor constante (1.205 m^{-1}) acrescido de uma gaussiana, que atinge seu valor máximo (1.354 m^{-1} , total) em $z = 15 \text{ m}$;

No procedimento de inversão, representa-se o perfil de b por um conjunto discreto de $n = 11$ pontos igualmente espaçados, sendo o primeiro e o último correspondentes, respectivamente, à superfície (0 m) e ao nível mais profundo (30 m). Assim, deseja-se estimar:

$$b_k \quad (k = 1, 2, \dots, 11)$$

Seguem-se os limites impostos, que também abrangem quase toda a faixa de b para águas costeiras e estuarinas e a estimativa inicial $b_k^{(0)}$:

$$0.50 \leq b_k \leq 2.40 \text{ m}^{-1} \quad \text{e} \quad b_k^{(0)} = 0.70 \text{ m}^{-1} \quad (k = 1, 2, \dots, 11)$$

Nas comparações efetuadas analisa-se a influência do fator de correção relativo à profundidade e , adota-se a mesma convenção da seção anterior para os fatores de correção:

- *EXP* - o fator $\sqrt{e^Z}$ (Equação 3.5);
- *BBL* - o fator baseado na lei de Beer-Bouguer-Lambert (Equação 3.6);

e para critério de escolha de γ na regularização por máxima entropia:

- *TE* - tentativa-e-erro;
- *ST* - critério de Sena e Toksöz (Equação 3.15);

Descrevem-se a seguir alguns dos vários casos abordados e os correspondentes valores de ρ e ϵ :

- 1) **Influência do fator de correção relativo à profundidade em perfil constante - dados sem ruído.** Estimou-se o perfil constante 1.205 m^{-1} , sem qualquer fator, verificando-se que os valores obtidos para os b_k na metade mais profunda são incorretos, de maneira similar ao que ocorria na inversão do perfil constante de absorção (Tabela 5.7 e Figura 5.11). O uso do fator *EXP*, que corrigia esses erros na estimação de perfis de absorção, gerou instabilidades, levando a um resultado totalmente espúrio. A solução obtida com o fator *BBL* somente apresentou instabilidades nas profundidades maiores, justamente onde a magnitude da correção é dominante. Testou-se também um esquema híbrido, no qual estima-se o perfil $b(z)$ sem

qualquer fator de correção e, fixando-se os valores b_k correspondentes às profundidades menores (supostamente mais próximos dos exatos), faz-se uma re-estimação com uso do fator EXP . Adotou-se, com base nos casos analisados, o critério empírico de fixar os b_k 's de $z = 0$ à profundidade na qual as irradiâncias sofreram uma atenuação de aproximadamente 60% em relação a seus valores em $z = 0$. Obtêve-se assim uma solução ligeiramente melhor, embora próxima daquela com o fator BBL , em termos dos ϵ 's (Tabela 5.7 e Figura 5.12). Nota-se que o ρ correspondente ao esquema híbrido foi calculado a partir do $R(\mathbf{p})$ correspondente à iteração final da estimação sem fator, ou seja, seu valor "absoluto" seria 0.1582475×10^{-5} , que corresponde ao produto de ambos os ρ 's.

- 2) **Influência da regularização para perfil constante - dados com 2% de ruído.** Novamente, para o perfil constante 1.205 m^{-1} , analisaram-se casos sem nenhum fator de correção e com o fator EXP . Testaram-se casos com regularização por máxima entropia segundo o critério TE e também segundo ST . Inicialmente compara-se a estimação para dados com e sem ruído, ambos sem qualquer fator de correção, não se fazendo uso de regularização (Figura 5.13). Constata-se que, com a presença de ruído, os resultados ficaram piores, com surgimento de oscilações nas profundidades menores, há necessidade de regularização. No entanto, não apareceram instabilidades nas profundidades maiores, onde os resultados já estavam comprometidos devido à falta de informação (irradiâncias quase nulas). A seguir, confrontam-se os resultados, obtidos sem nenhum fator de correção relativo à profundidade com aqueles obtidos com o fator EXP para diferentes critérios de escolha do parâmetro de regularização. Os critérios TE ($\gamma = 0.50$) e ST foram comparados, inicialmente sem utilização de fator de correção (Tabela 5.8 e Figura 5.14), obtendo-se bons resultados em ambos os casos, embora melhores com ST . Fazendo-se a mesma comparação entre TE ($\gamma = 0.50$) e ST , com o uso do fator EXP (Tabela 5.8 e Figura 5.15), nota-se que a solução correspondente ao primeiro é totalmente ruim (oscilações pronunciadas), enquanto que ST resultou numa solução muito próxima da exata. As duas soluções melhores, relativas à regularização por ST , sem/com o fator EXP são comparadas na Figura 5.16, que mostra também a curva obtida sem regularização. Observa-se, na tabela mencionada, que o pior caso corresponde a $EXP-TE$ ($\gamma = 0.50$), para o qual $\epsilon > 1$, embora, curiosamente, seu ρ seja o segundo menor.
- 3) **Influência do fator de correção relativo à profundidade em perfil variável - dados sem ruído.** Tomando-se um perfil gaussiano, sem o uso de qualquer fator de correção, constatou-se novamente a degradação dos resultados para profundidades maiores (Tabela 5.9 e Figura 5.17). O fator EXP levou a uma solução totalmente espúria, enquanto que o fator BBL apresentou oscilações, de amplitude crescente com a profundidade. A melhor solução foi a obtida sem nenhum fator de correção, correspondente

aos menores valores de ρ e ϵ . Isso se deve talvez à correção do fator *EXP*, que corrige de maneira excessiva o decaimento das irradiâncias com a profundidade, algumas ordens de grandeza acima, enquanto que o fator *BBL* é calculado a partir do próprio decaimento, para cada tipo de irradiância. Entretanto, nas profundidades maiores, onde as irradiâncias são quase nulas, esse fatores parecem apenas amplificar os ruídos existentes (numéricos ou não), levando às referidas oscilações.

- 4) **Influência da regularização na estimação de perfil variável - dados com 2% de ruído.** Finalmente, na estimação do perfil gaussiano sem uso de qualquer fator de correção de profundidade, compararam-se os diferentes critérios de escolha do parâmetro de regularização já utilizados neste trabalho (Tabela 5.10). Novamente, *ST* levou a uma solução “achatada”, mas razoavelmente boa, enquanto que *ST* ponderado por $\lambda = 0.90$ levou a uma solução espúria, com oscilações pronunciadas (Figura 5.18). O critério *TE* apresentou soluções com oscilações decrescentes com a profundidade, os quais apresentaram amplitudes menores para γ 's maiores: o uso de $\gamma = 50.00$ “achatou” a solução (Figura 5.19). A Figura 5.20 compara as duas melhores soluções, *ST* e *TE* ($\gamma = 50.00$), que correspondem aos menores ϵ 's (mas aos maiores ρ 's).

Seguem-se as sequências de tabelas e figuras relativas aos casos enumerados acima.

TABELA 5.7 - PERFIL CONSTANTE DE ESPALHAMENTO SEM RUÍDO: INFLUÊNCIA DO FATOR DE CORREÇÃO RELATIVO À PROFUNDIDADE.

caso analisado	ρ	ϵ
sem fator	0.5867975×10^{-4}	0.5538839
com fator <i>EXP</i>	0.5841720×10^{-2}	0.9981480
com fator <i>BBL</i>	0.7422360×10^{-6}	0.3075024
esquema híbrido	0.0269680	0.2893641

TABELA 5.8 - PERFIL CONSTANTE DE ESPALHAMENTO COM RUÍDO: ESTIMAÇÕES SEM/COM FATOR *EXP* E UTILIZANDO CRITÉRIOS *TE* OU *ST*.

caso analisado	ρ	ϵ
sem fator, sem regularização	0.0731231	0.5588310
sem fator, <i>TE</i> ($\gamma = 0.50$)	0.0731320	0.0590211
sem fator, <i>ST</i>	0.0852606	0.6653763×10^{-2}
com fator <i>EXP</i> , <i>TE</i> ($\gamma = 0.50$)	0.0142012	1.4323100
com fator <i>EXP</i> , <i>ST</i>	0.3363144×10^{-3}	0.0114190

TABELA 5.9 - PERFIL VARIÁVEL DE ESPALHAMENTO SEM RUÍDO: INFLUÊNCIA DO FATOR DE CORREÇÃO RELATIVO À PROFUNDIDADE.

caso analisado	ρ	ϵ
sem fator	0.1057243×10^{-4}	0.4068856
com fator <i>EXP</i>	0.2544652×10^{-2}	0.5247551
com fator <i>BBL</i>	0.2136353×10^{-4}	0.8799298

TABELA 5.10 - PERFIL VARIÁVEL DE ESPALHAMENTO COM RUÍDO: INFLUÊNCIA DA REGULARIZAÇÃO.

caso analisado	ρ	ϵ
<i>ST</i>	0.0830948	0.0292021
<i>ST</i> , $\lambda = 0.90$	0.0455561	0.8141389
<i>TE</i> , $\gamma = 0.50$	0.0460804	0.3665571
<i>TE</i> , $\gamma = 5.00$	0.0488208	0.2241277
<i>TE</i> , $\gamma = 50.00$	0.0609624	0.0855156

b (1/m)

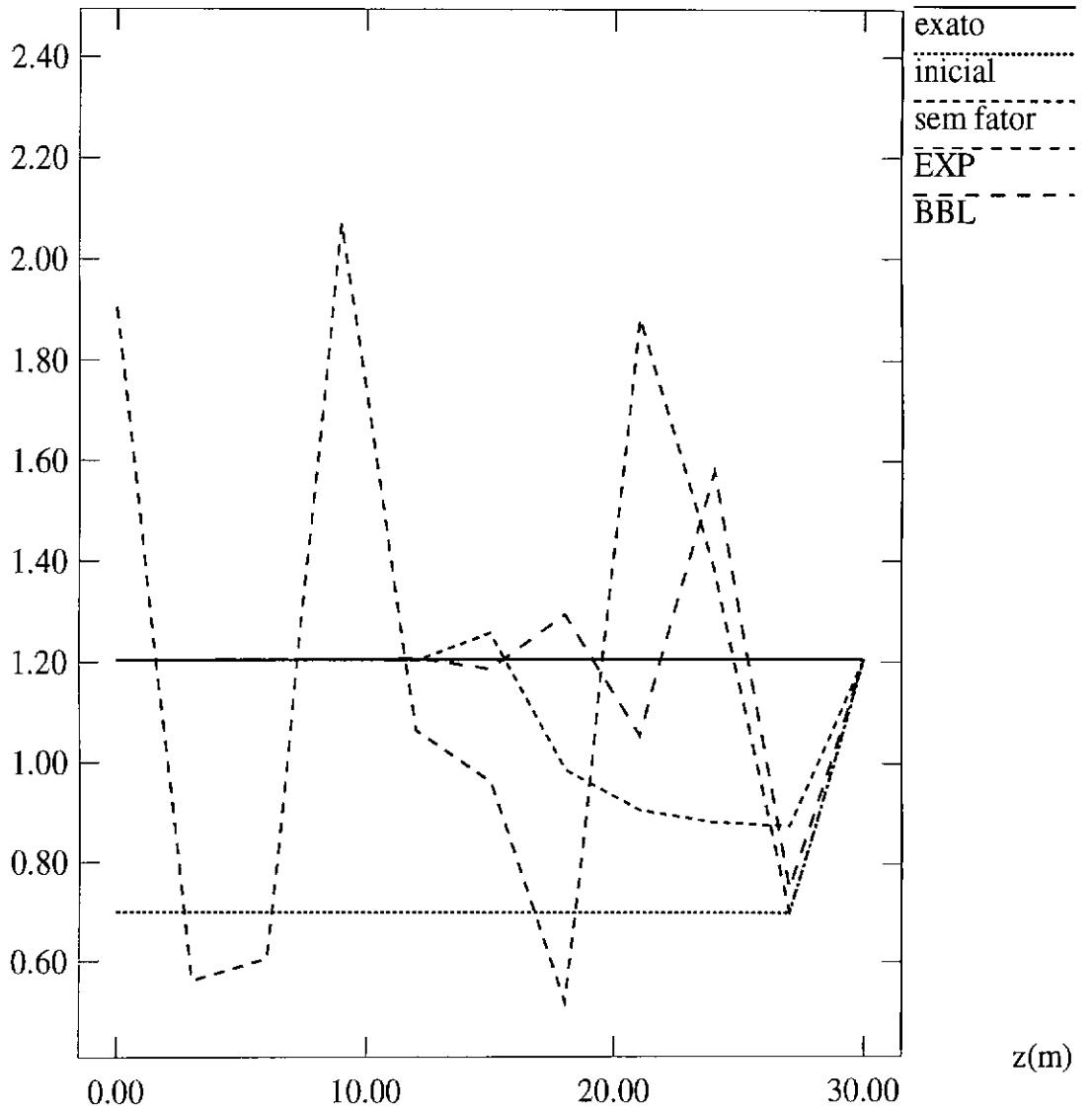


Fig. 5.11 - Perfil constante de espalhamento sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade.

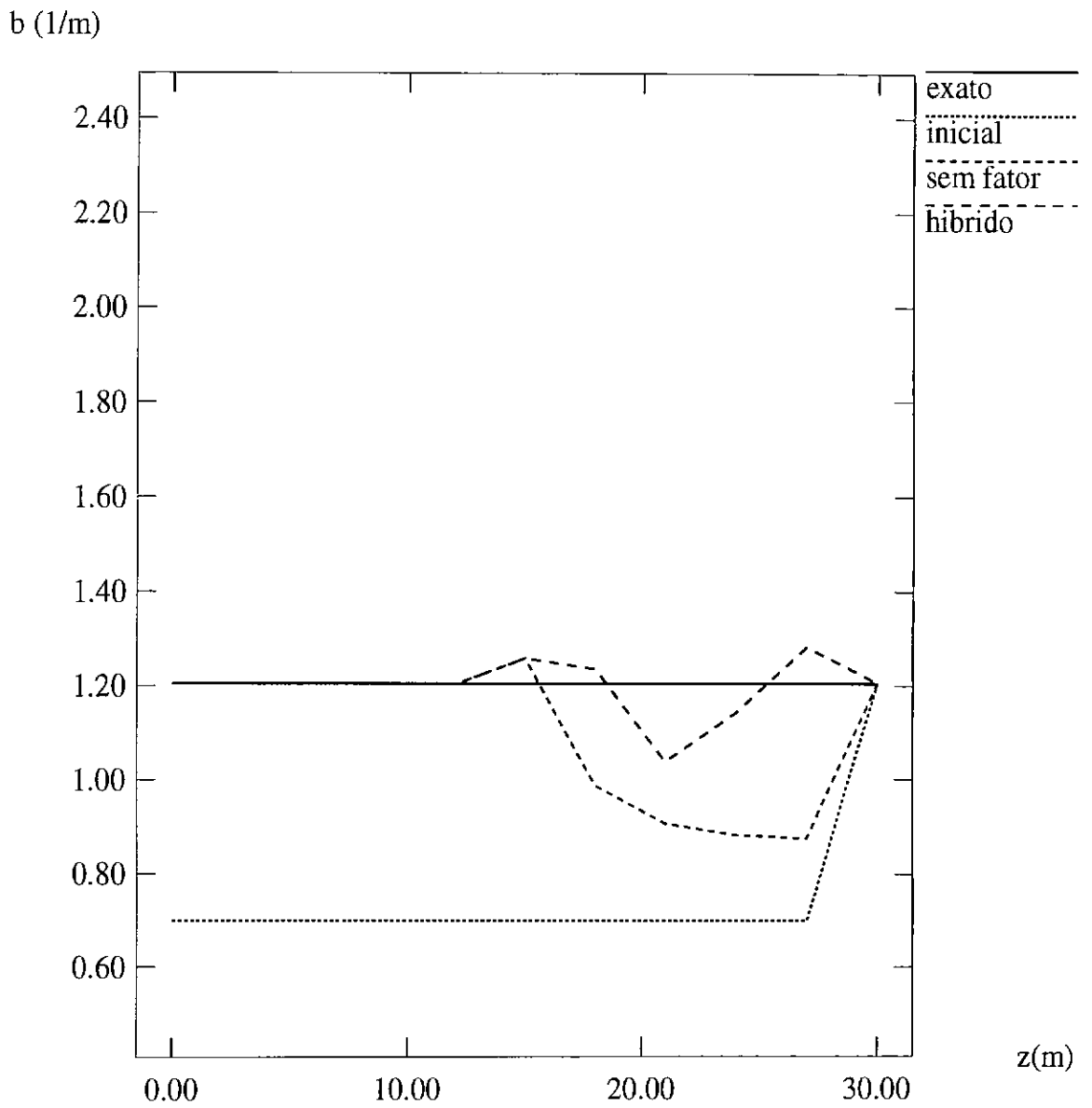


Fig. 5.12 - Perfil constante de espalhamento sem ruído: estimação sem fator algum e esquema híbrido com o fator *EXP*.

b (1/m)

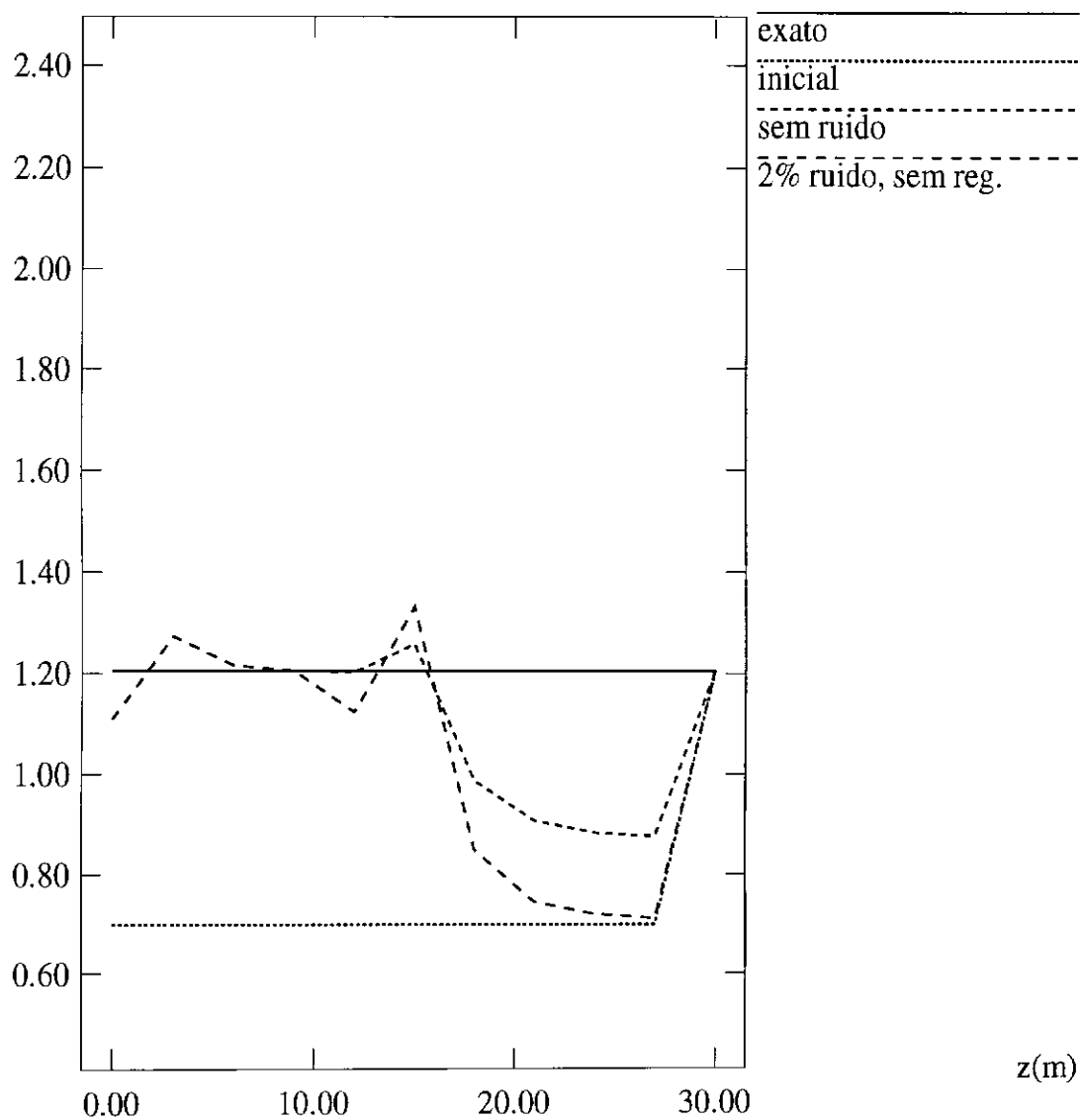


Fig. 5.13 - Perfil constante de espalhamento: estimação para dados sem ruído e com ruído de 2% (ambos sem fator de correção).

b (1/m)

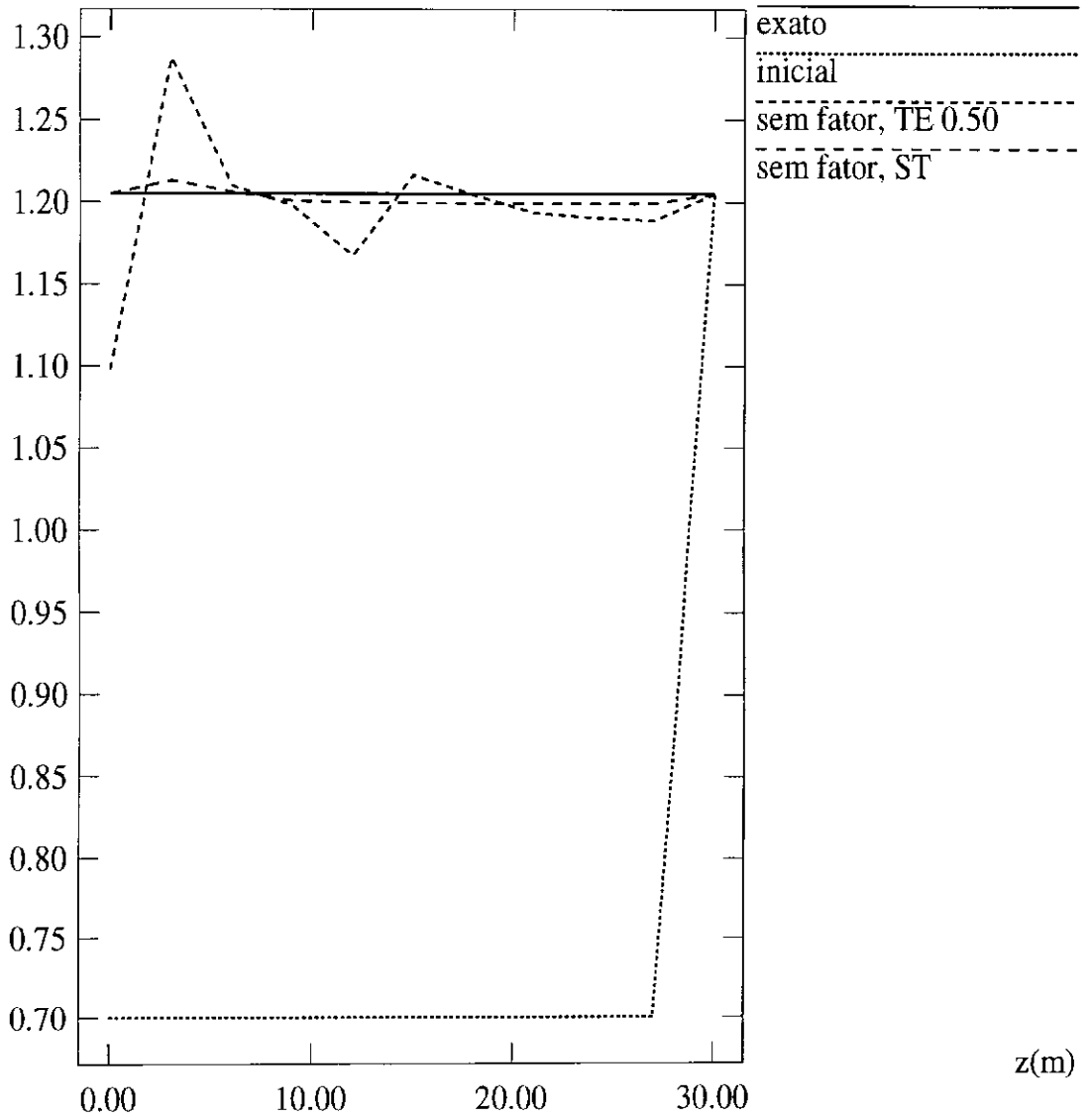


Fig. 5.14 - Perfil constante de espalhamento com ruído: comparação entre *TE* e *ST*, ambos sem fator de correção.

b (1/m)

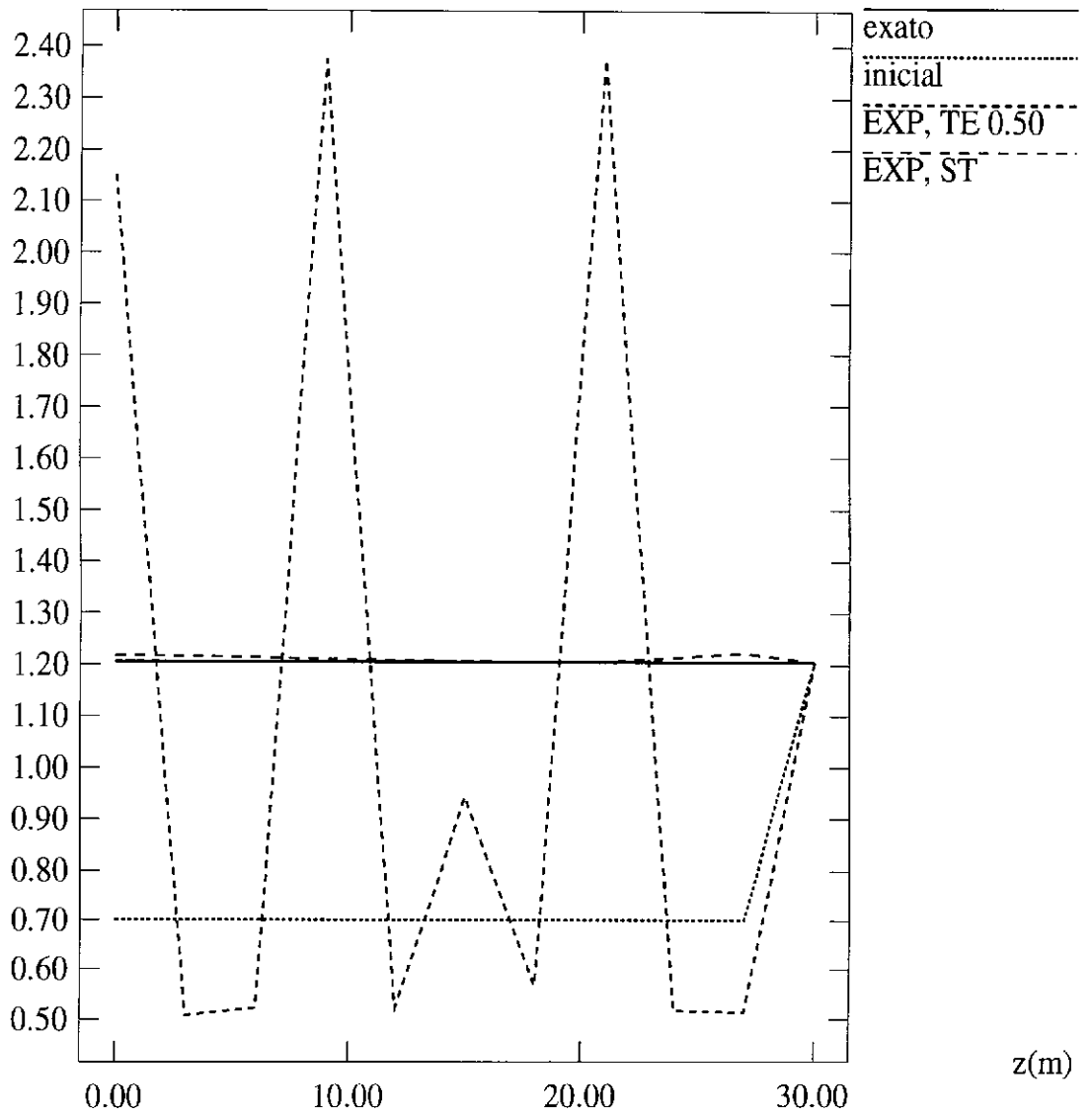


Fig. 5.15 - Perfil constante de espalhamento com ruído: comparação entre TE e ST , ambos com fator EXP .

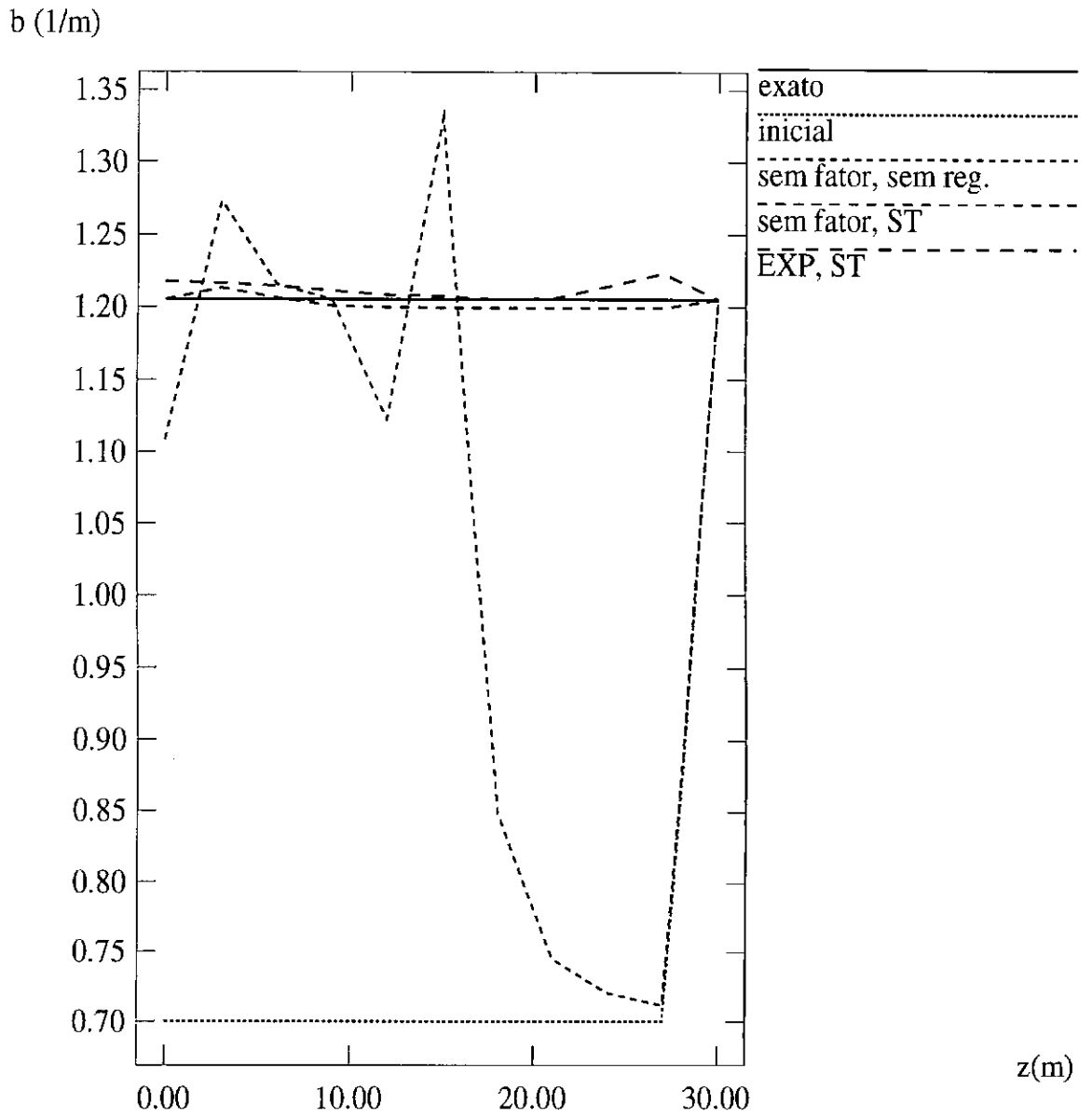


Fig. 5.16 - Perfil constante de espalhamento com ruído: estimaco sem/com fator *EXP*, ambos com critrio *ST*.

b (1/m)

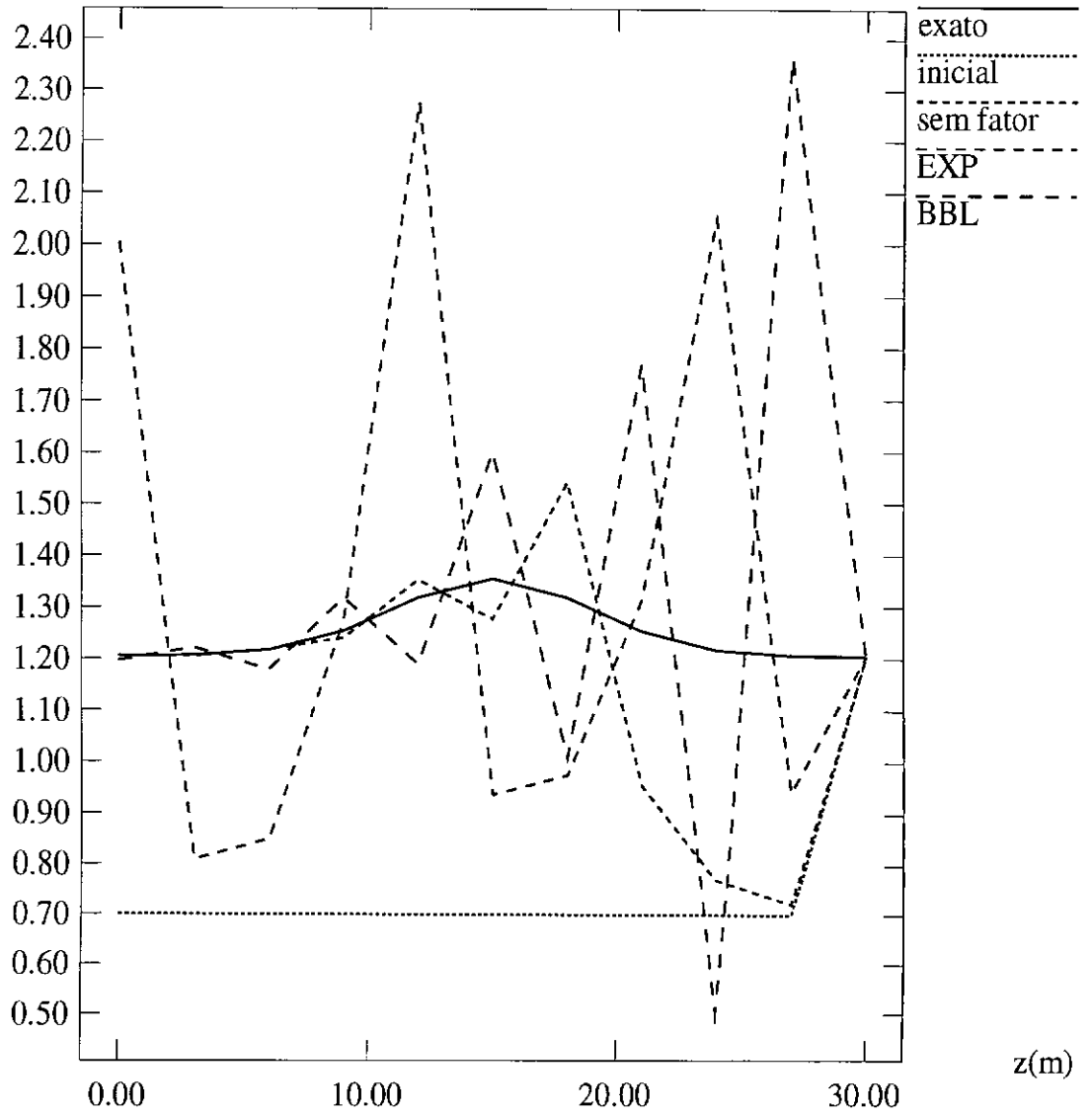


Fig. 5.17 - Perfil variável de espalhamento sem ruído: influência do fator de correção relativo à profundidade.

b (1/m)

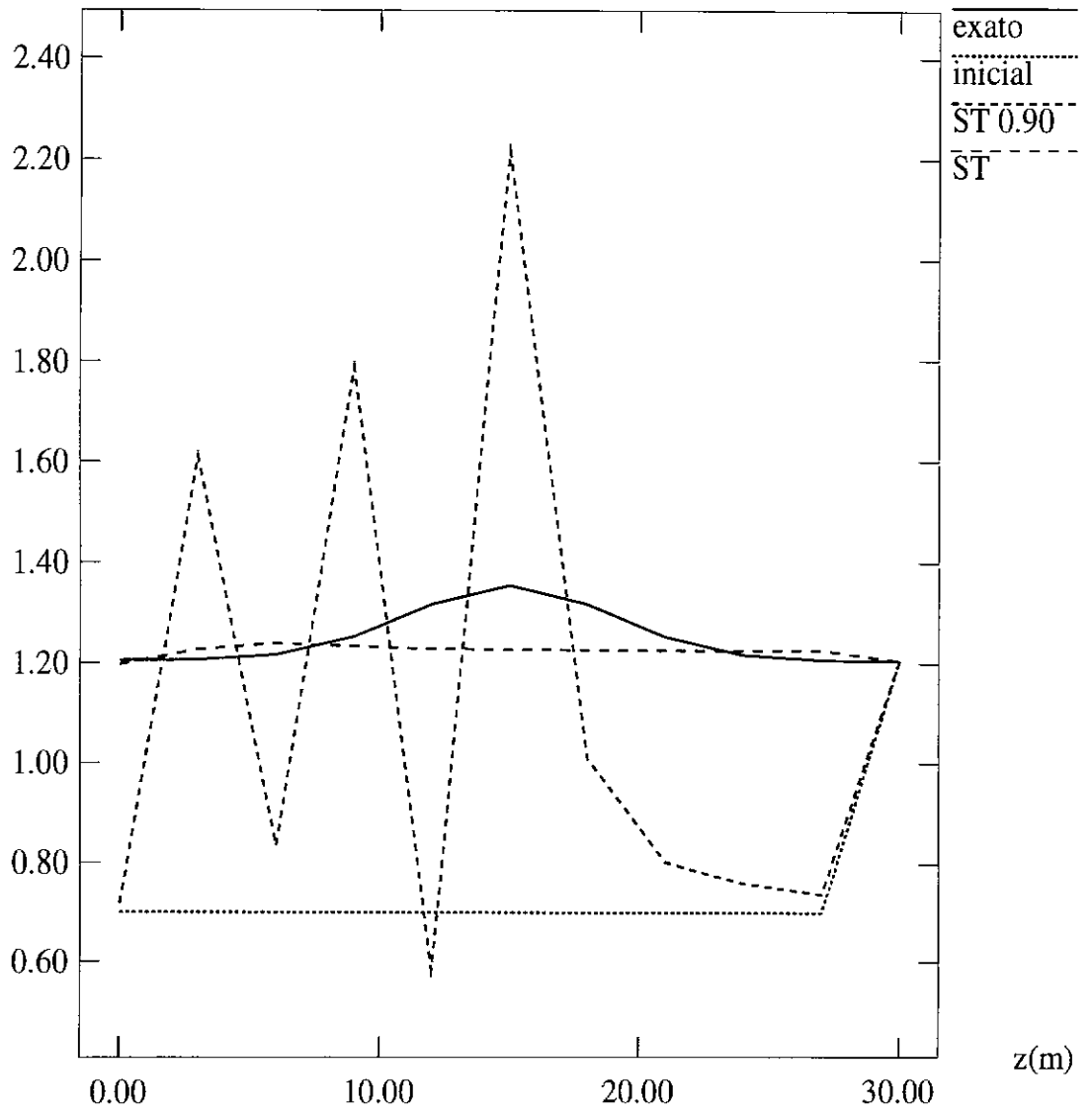


Fig. 5.18 - Perfil variável de espalhamento com ruído: influência da regularização ST (sem fator de correção).

b (1/m)

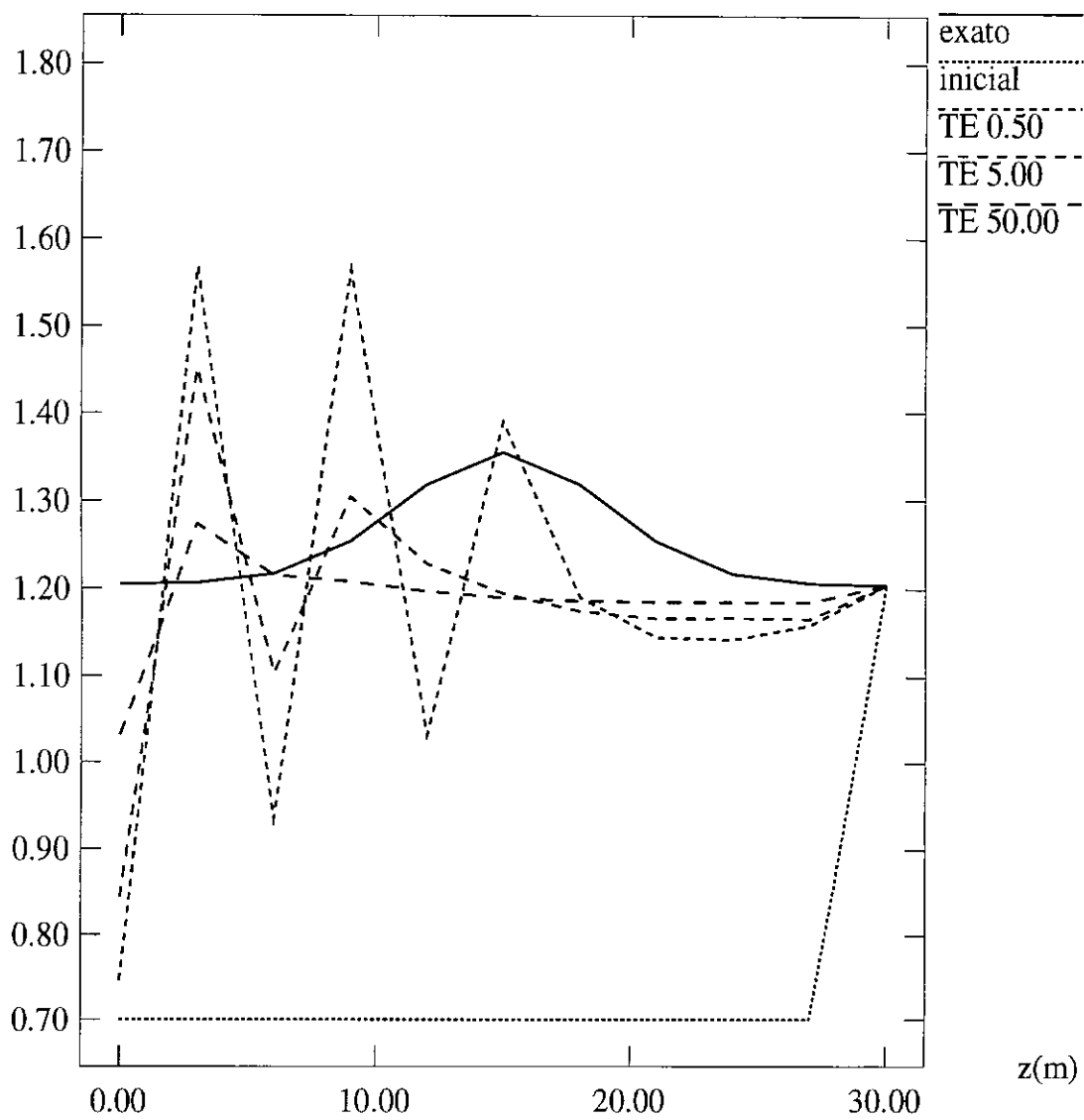


Fig. 5.19 - Perfil variável de espalhamento com ruído: influência da regularização TE (sem fator de correção).

b (1/m)

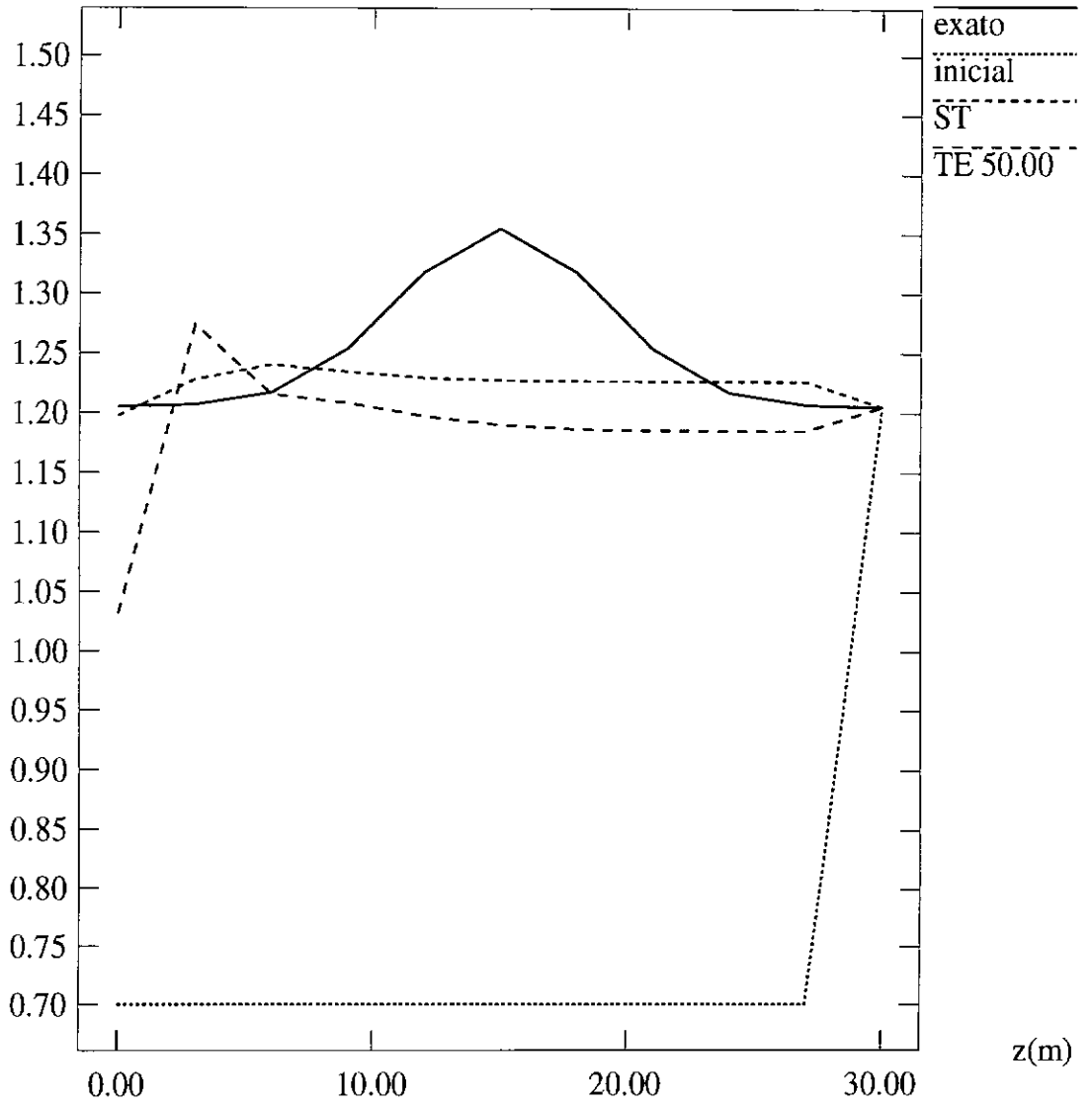


Fig. 5.20 - Perfil variável de espalhamento com ruído: comparação dos critérios TE e ST (sem fator de correção).

5.4 Síntese dos Resultados na Estimação Isolada de Perfis de Absorção e de Espalhamento

Diante dos resultados obtidos e para os casos analisados, pode-se observar, com relação à estimação de perfis verticais de absorção, que:

- 1) A metodologia proposta é capaz de reconstruir perfis constantes ou variáveis de absorção, com e sem ruído.
- 2) Para perfis constantes ou variáveis, torna-se necessário o uso de um fator de correção relativo à profundidade, sendo o fator *EXP* ligeiramente preferível ao *BBL*.
- 3) Para perfis constantes ou variáveis, dados com ruído exigem o uso de técnicas de regularização, tendo-se obtido bons resultados com a regularização por máxima entropia.
- 4) Os resultados obtidos na regularização de máxima entropia pelo critério *TE* foram bons, para perfis constantes ou variáveis, a qualidade destes dependendo da escolha de γ . O uso do critério *ST* parece ser mais eficiente para perfis constantes, pois frequentemente leva a uma sobrerregularização, que “achata” as curvas estimadas.

Diante dos resultados obtidos e para os casos analisados, pode-se observar com relação à estimação de perfis verticais de espalhamento, que:

- 1) A metodologia proposta é capaz de reconstruir perfis constantes de espalhamento, com e sem ruído. Quanto aos perfis variáveis, obtiveram-se estimações razoáveis somente na parte correspondente às profundidades menores.
- 2) Para perfis constantes ou variáveis, o uso de fatores de correção relativos à profundidade parece ser discutível, uma vez que acarreta instabilidades que levam a soluções espúrias. No entanto, empregou-se o fator *EXP* com sucesso quando combinado com uma técnica específica de regularização, como explicado no item seguinte. O esquema híbrido, no qual estima-se um perfil sem qualquer fator de correção e, fixando-se a parte do perfil correspondente às profundidades menores, re-estima-se o perfil com o fator *EXP*, forneceu uma solução ligeiramente melhor num caso específico (perfil constante, sem ruído), mas não a ponto de ser adotado na metodologia proposta.
- 3) Para perfis constantes ou variáveis, dados com ruído exigem o uso de técnicas de regularização, tendo-se obtido bons resultados com a regularização por máxima entropia.
- 4) Para perfis constantes, o uso do critério *ST* na regularização dá bons resultados, com ou sem o fator *EXP*. Isso leva a supor que esse critério “suaviza”

as oscilações geradas por esse fator. Considerando-se o critério TE , sem fator EXP , obteve-se uma boa solução, enquanto que a combinação $TE-EXP$ falhou totalmente.

- 5) No caso de perfis variáveis, com relação à regularização por máxima entropia utilizada, o uso do critério ST ponderado pode levar a resultados espúrios, enquanto que ST não-ponderado tende a “achatar” a curva, todavia fornecendo uma solução fisicamente aceitável. O critério TE dá bons resultados quando valores suficientemente altos de γ também “achatam” a solução.
- 6) Em alguns casos, notou-se que a utilização de limites mais estreitos, no sentido de serem mais próximos da solução procurada, tem grande influência na reconstrução. Esta observação, juntamente com o exposto anteriormente, indica que a estimação do espalhamento constitui um problema mais difícil que a estimação da absorção, o que poderia levar ao desenvolvimento de uma metodologia específica, por exemplo o uso de uma aproximação polinomial ou por *splines* para modelar o perfil do coeficiente de espalhamento.
- 7) Tudo indica que os maus resultados podem ser atribuídos à pouca informação disponível nas profundidades maiores para a estimação do perfil de espalhamento, uma vez que as irradiâncias são quase nulas e a utilização de fatores de correção relativos à profundidade parece apenas amplificar os ruídos existentes, levando a instabilidades.

5.5 Estimação Conjunta dos Coeficientes de Absorção e de Espalhamento

A situação mais geral corresponde à estimação conjunta dos perfis verticais do coeficiente de absorção e espalhamento a partir dos dados experimentais, constituídos pelas irradiâncias *in situ* para as diversas profundidades. Pode-se incluir também a estimação do perfil vertical de bioluminescência.

Nesses casos em que $a(z)$ e $b(z)$ tinham que ser ambos reconstruídos, essas inversões foram efetuadas **separadamente**, optando-se por estimações *alternadas* de $a(z)$ e $b(z)$, pois a metodologia testada para estimação conjunta e *simultânea* não funcionou. Na estimação conjunta e alternada proposta neste trabalho, atribui-se um valor arbitrário para b e estima-se a e, fixando-se este último valor de a estima-se b e assim sucessivamente. O procedimento oposto, ou seja, estimar-se inicialmente b , a partir de um valor arbitrário de a , não dá bons resultados, pois a influência da absorção nas irradiâncias é muito maior que a do espalhamento. Quando um mesmo problema envolve também a estimação de fontes de bioluminescência, alterna-se a estimação de a e b com a estimação dessas fontes, sempre iniciando-se a sucessão de inversões a partir da estimação do perfil de a , sem considerar bioluminescência, seguida pela estimação do perfil de b e finalmente pelo perfil de bioluminescência, e assim sucessivamente.

Na Seção 5.5.1 ilustra-se a estimação conjunta de valores únicos de a e b e do perfil de bioluminescência e , na Seção 5.5.2, a estimação conjunta de perfis $a(z)$ e $b(z)$, sem bioluminescência. Finalmente, na Seção 5.5.3, repete-se esta estimação de perfis com bioluminescência.

5.5.1 Estimação Conjunta de Valores Únicos e do Perfil de Bioluminescência

No caso exposto a seguir (55), estimaram-se valores únicos para os coeficientes de absorção e de espalhamento e um perfil gaussiano para as fontes de bioluminescência. Os dados sintéticos correspondem exatamente ao caso 1 do capítulo IV, *sem ruído*. Observa-se que, em se tratando de dados com ruído, não se utilizam técnicas de regularização para um valor único, seja de a ou de b . Os coeficientes **constantes** de absorção e espalhamento a serem reconstruídos são :

$$\begin{aligned} a &= 0.125 \text{ m}^{-1} \\ b &= 1.205 \text{ m}^{-1} \end{aligned}$$

As fontes gaussianas de bioluminescência, igualmente espaçadas, foram modeladas conforme a Equação 4.1, tanto no modelo direto como no inverso, exatamente como na Seção 4.3.1 (caso 1). As intensidades q_k (unidades $Wm^{-2}sr^{-1}nm^{-1}$), $k = 1, 2, \dots, 10$, a serem reconstruídas são:

$$\begin{aligned} q_4 &= 16.00 & (z_4 = 10.5 \text{ m}) \\ q_6 &= 5.12 & (z_6 = 16.5 \text{ m}) \\ q_k &= 0 & (k \neq 4, 6) \end{aligned}$$

A estratégia adotada resume-se a:

- 1) Adotando-se, no modelo inverso, bioluminescência nula, estimar o par de parâmetros (a, b) , ou seja, $N_p = 2$;
- 2) A partir desses resultados, estimar o perfil de bioluminescência ($N_p = 10$) para desvio padrão $\sigma = 0.75$;
- 3) Assumindo-se o perfil de bioluminescência como sendo o encontrado acima, re-estimar o par (a, b) , tendo-se novamente $N_p = 2$ e repetindo-se a sequência de estimações;

Os resultados foram analisados pelo valor da função objetivo $J(\mathbf{p})$, sem termo de regularização e sem fator de correção de profundidade, conforme abaixo:

$$J(\mathbf{p}) = R(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N_z} R_i(\mathbf{p}),$$

onde $R(\mathbf{p})$ foi definido na Equação 3.3. Seguem-se os limites impostos e as estimativas iniciais para os parâmetros. Para as intensidades de fontes considerou-se que:

$$0 \leq q_k \leq 20 \quad Wm^{-2}sr^{-1}nm^{-1} \quad \text{e} \quad q_k^{(0)} = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, 10)$$

Tem-se, para os coeficientes de absorção e de espalhamento, limites correspondendo à faixa de variação típica para águas costeiras:

$$0 \leq a \leq 0.5 \text{ m}^{-1} \quad \text{e} \quad a^{(0)} = 0.1 \text{ m}^{-1}$$

$$0 \leq b \leq 1.5 \text{ m}^{-1} \quad \text{e} \quad b^{(0)} = 0.1 \text{ m}^{-1}$$

A sequência alternada entre estimação dos coeficientes a e b e a estimação de fontes é mostrada a seguir (os índices superiores indicam o número da iteração) e os valores de $J(\mathbf{p})$ correspondem aos valores finais de cada iteração:

Iteração 1: estimar a e b ($N_p = 2$) a partir de $a^{(0)}$ e $b^{(0)}$,
assumir fontes $q_k^{(0)} = 0$ ($k = 0, \dots, 10$):

$$a^{(1)} = 0.119967$$

$$b^{(1)} = 1.17390$$

$$J^1(\mathbf{p}) = 0.7236185 \times 10^{-2}$$

Iteração 2: estimar p_k ($N_p = 10$) a partir de $p_k^{(0)} = 0$ ($k = 0, \dots, 10$),
assumir $a = a^{(1)}$ e $b = b^{(1)}$:

$$q_4^{(2)} = 11.9333$$

$$q_6^{(2)} = 4.41969$$

$$q_k^{(2)} = 0 \quad (k \neq 4, 6)$$

$$J^{(2)}(\mathbf{p}) = 0.1575326 \times 10^{-2}$$

Iteração 3: estimar a e b ($N_p = 2$) a partir de $a^{(1)}$ e $b^{(1)}$,
assumir fontes $q_k^{(0)} = q_k^{(2)}$ ($k = 0, \dots, 10$):

$$a^{(3)} = 0.123691$$

$$b^{(3)} = 1.19912$$

$$J^{(3)}(\mathbf{p}) = 0.3937549 \times 10^{-3}$$

Iteração 4: estimar p_k ($N_p = 10$) a partir de $q_k^{(0)} = q_k^{(2)}$ ($k = 0, \dots, 10$),
assumir $a = a^{(3)}$ e $b = b^{(3)}$:

$$q_4^{(4)} = 14.9774$$

$$q_6^{(4)} = 4.94933$$

$$q_k^{(4)} = 0 \quad (k \neq 4, 6)$$

$$J^{(4)}(\mathbf{p}) = 0.9702527 \times 10^{-4}$$

Iteração 5: estimar a e b ($N_p = 2$) a partir de $a^{(3)}$ e $b^{(3)}$,
assumir fontes $q_k^{(0)} = q_k^{(4)}$ ($k = 0, \dots, 10$):

$$\begin{aligned} a^{(5)} &= 0.124675 \\ b^{(5)} &= 1.20326 \\ J^{(5)}(\mathbf{p}) &= 0.2457947 \times 10^{-4} \end{aligned}$$

Iteração 6: estimar p_k ($N_p = 10$) a partir de $q_k^{(0)} = q_k^{(4)}$ ($k = 0, \dots, 10$),
assumir $a = a^{(5)}$ e $b = b^{(5)}$:

$$\begin{aligned} q_4^{(6)} &= 14.9770 \\ q_6^{(6)} &= 4.94902 \\ q_k^{(6)} &< 3.00 \times 10^{-5} \quad (k \neq 4, 6) \\ J^{(6)}(\mathbf{p}) &= 0.2460046 \times 10^{-4} \end{aligned}$$

Como houve um aumento do valor da função objetivo ($J^{(6)}(\mathbf{p}) > J^{(5)}(\mathbf{p})$), na iteração seguinte foi feita uma estimativa **conjunta** de todos os parâmetros, para depois continuar-se a estimar alternadamente o par (a, b) e as fontes.

Iteração 7: estimar *conjuntamente* a , b e p_k ($N_p = 12$) a partir de $a = a^{(5)}$,
 $b = b^{(5)}$ e $q_k^{(0)} = q_k^{(4)}$ ($k = 0, \dots, 10$):

$$\begin{aligned} a^{(7)} &= 0.124700 \\ b^{(7)} &= 1.20330 \\ q_4^{(7)} &= 15.7652 \\ q_6^{(7)} &= 5.07810 \\ q_k^{(7)} &= 0 \quad (k \neq 4, 6) \\ J^{(7)}(\mathbf{p}) &= 0.5271672 \times 10^{-5} \end{aligned}$$

Iteração 8: estimar a e b ($N_p = 2$) a partir de $a^{(7)}$ e $b^{(7)}$,
assumir fontes $q_k^{(0)} = q_k^{(7)}$ ($k = 0, \dots, 10$):

$$\begin{aligned} a^{(8)} &= 0.124921 \\ b^{(8)} &= 1.20459 \\ J^{(8)}(\mathbf{p}) &= 0.1303120 \times 10^{-5} \end{aligned}$$

Iteração 9: estimar p_k ($N_p = 10$) a partir de $q_k^{(0)} = q_k^{(7)}$ ($k = 0, \dots, 10$),
assumir $a = a^{(8)}$ e $b = b^{(8)}$:

$$\begin{aligned} q_4^{(9)} &= 15.7650 \\ q_6^{(9)} &= 5.07800 \\ q_k^{(9)} &= 0 \quad (k \neq 4, 6) \\ J^{(9)}(\mathbf{p}) &= 0.1305246 \times 10^{-5} \end{aligned}$$

Como novamente houve um aumento do valor da função objetivo ($J^{(9)}(\mathbf{p}) > J^{(8)}(\mathbf{p})$), na iteração seguinte voltou-se a fazer uma estimativa **conjunta** de todos os parâmetros:

Iteração 10: estimar *conjuntamente* a , b e p_k ($N_p = 12$) a partir de $a = a^{(8)}$, $b = b^{(8)}$ e $q_k^{(0)} = q_k^{(7)}$ ($k = 0, \dots, 10$):

$$\begin{aligned} a^{(10)} &= 0.124900 \\ b^{(10)} &= 1.20460 \\ q_4^{(10)} &= 15.7653 \\ q_6^{(10)} &= 5.07812 \\ q_k^{(10)} &< 4.00 \times 10^{-5} \quad (k \neq 4, 6) \\ J^{(10)}(\mathbf{p}) &= 0.1344857 \times 10^{-5} \end{aligned}$$

Esse novo aumento do valor da função objetivo levou ao encerramento do processo iterativo, considerando-se como valores finais aqueles obtidos nas iterações 7 (fontes) e 8 (coeficientes de absorção e de espalhamento). Pode-se constatar que os resultados foram bons, conforme a Tabela 5.11, na qual mostram-se também os respectivos *erros relativos* em relação aos valores exatos.

TABELA 5.11 - RESULTADOS DA ESTIMAÇÃO CONJUNTA DE VALORES ÚNICOS DE a E b E DO PERFIL DE BIOLUMINESCÊNCIA.

parâmetro	resultado obtido	valor exato	erro relativo
a	0.12492	0.12500	0.632×10^{-3}
b	1.20459	1.20500	0.340×10^{-3}
q_4	15.7652	16.0000	0.0147
q_6	5.07810	5.12000	0.818×10^{-2}

5.5.2 Estimação Conjunta de Perfis Verticais com Ruído

Expõe-se a seguir um caso de estimação conjunta e *alternada* de perfis verticais *constantes* dos coeficientes de absorção e de espalhamento, **sem** fontes de bioluminescência. Os dados sintéticos foram gerados para as mesmas condições do caso anterior (Seção 5.5.1), exceto pela presença de ruído gaussiano de 2% nos dados e, naturalmente, pela ausência de bioluminescência. Os perfis **constantes** de absorção e espalhamento a serem reconstruídos são :

$$\begin{aligned} a(z) &= 0.125 \text{ m}^{-1} \\ b(z) &= 1.205 \text{ m}^{-1} \end{aligned}$$

Em todos os casos, representam-se os perfis de a e de b por um conjunto discreto de $n = 11$ pontos igualmente espaçados, sendo o primeiro e o último correspondentes,

respectivamente, à superfície e ao nível mais profundo. Assim, desejam-se estimar:

$$a_k, b_k \quad (k = 1, 2, \dots, 11)$$

Seguem-se os limites impostos e as estimativas iniciais para os parâmetros. Adotaram-se, para os coeficientes de absorção e de espalhamento ($k = 1, 2, \dots, 11$):

$$\begin{aligned} 0 \leq a_k \leq 0.5 \text{ m}^{-1} & \quad \text{e} \quad a_k^{(0)} = 0.250 \text{ m}^{-1} \\ 0.5 \leq b_k \leq 2.4 \text{ m}^{-1} & \quad \text{e} \quad b_k^{(0)} = 0.875 \text{ m}^{-1} \end{aligned}$$

A estratégia adotada resume-se a:

- 1) Adotando-se $b_k = b_k^{(0)}$, estimar os parâmetros a_k ($N_p = 11$);
- 2) A partir desses resultados, estimar os b_k ($N_p = 11$);
- 3) A partir desses resultados, re-estimar os a_k ($N_p = 11$) novamente e assim por diante, repetindo-se a sequência de estimações enquanto o valor final obtido para a função objetivo for diminuindo;

Os resultados foram analisados pelo valor da função objetivo $J(\mathbf{p})$, com regularização por máxima entropia pelo critério ST (Equação 3.15) e com a correção relativa à profundidade dada pelo fator $\sqrt{e^Z}$ (EXP , Equação 3.5), conforme abaixo. $R(\mathbf{p})$ foi definido na Equação 3.3).

$$J(\mathbf{p}) = \left[\sum_{i=1}^{N_z} \sqrt{e^{Z_i}} (R_i(\mathbf{p})) \right] [1 - (S(\mathbf{p})/S_{\max})] \quad (5.3)$$

A sequência alternada entre a estimação dos coeficientes a_k e b_k é apresentada a seguir, onde os índices superiores indicam o número da iteração. Essa sequência é composta de 5 iterações, 3 para o perfil de absorção e 2 para o perfil de espalhamento (Figuras 5.21 e 5.22). Em todas as iterações tem-se $k = 1, 2, \dots, 11$ e os valores de $J(\mathbf{p})$ correspondem aos valores finais de cada iteração.

Iteração 1: estimar a_k a partir de $a_k^{(0)}$, assumindo-se $b_k = b_k^{(0)}$;

$$J^{(1)}(\mathbf{p}) = 0.2002091 \times 10^{-1}$$

Iteração 2: estimar b_k a partir de $b_k^{(0)}$, assumindo-se $a_k = a_k^{(1)}$;

$$J^{(2)}(\mathbf{p}) = 0.1703637 \times 10^{-7}$$

Iteração 3: estimar a_k a partir de $a_k^{(1)}$, assumindo-se $b_k = b_k^{(2)}$;

$$J^{(3)}(\mathbf{p}) = 0.3539195 \times 10^{-3}$$

Iteração 4: estimar b_k a partir de $b_k^{(2)}$, assumindo-se $a_k = a_k^{(3)}$;

$$J^{(4)}(\mathbf{p}) = 0.1615016 \times 10^{-9}$$

Iteração 5: estimar a_k a partir de $a_k^{(3)}$, assumindo-se $b_k = b_k^{(4)}$;

$$J^{(5)}(\mathbf{p}) = 0.6989965 \times 10^{-7}$$

De uma maneira semelhante ao caso da seção anterior, iterações subsequentes levaram a uma piora (aumento) do valor de $J(\mathbf{p})$, considerando-se como resultados finais os correspondentes às iterações 4 (espalhamento) e 5 (absorção). Na Figura 5.21, mostram-se os sucessivos perfis estimados $a(z)$'s, enquanto que na Figura 5.22, os sucessivos perfis estimados $b(z)$'s (nota-se nesta figura que o perfil $b^{(2)}(z)$ foi praticamente semelhante ao $b^{(4)}(z)$). Observa-se que os resultados foram bons para ambos os perfis, obtendo-se perfis bem próximos dos exatos, tanto para o coeficiente de absorção como para o de espalhamento.

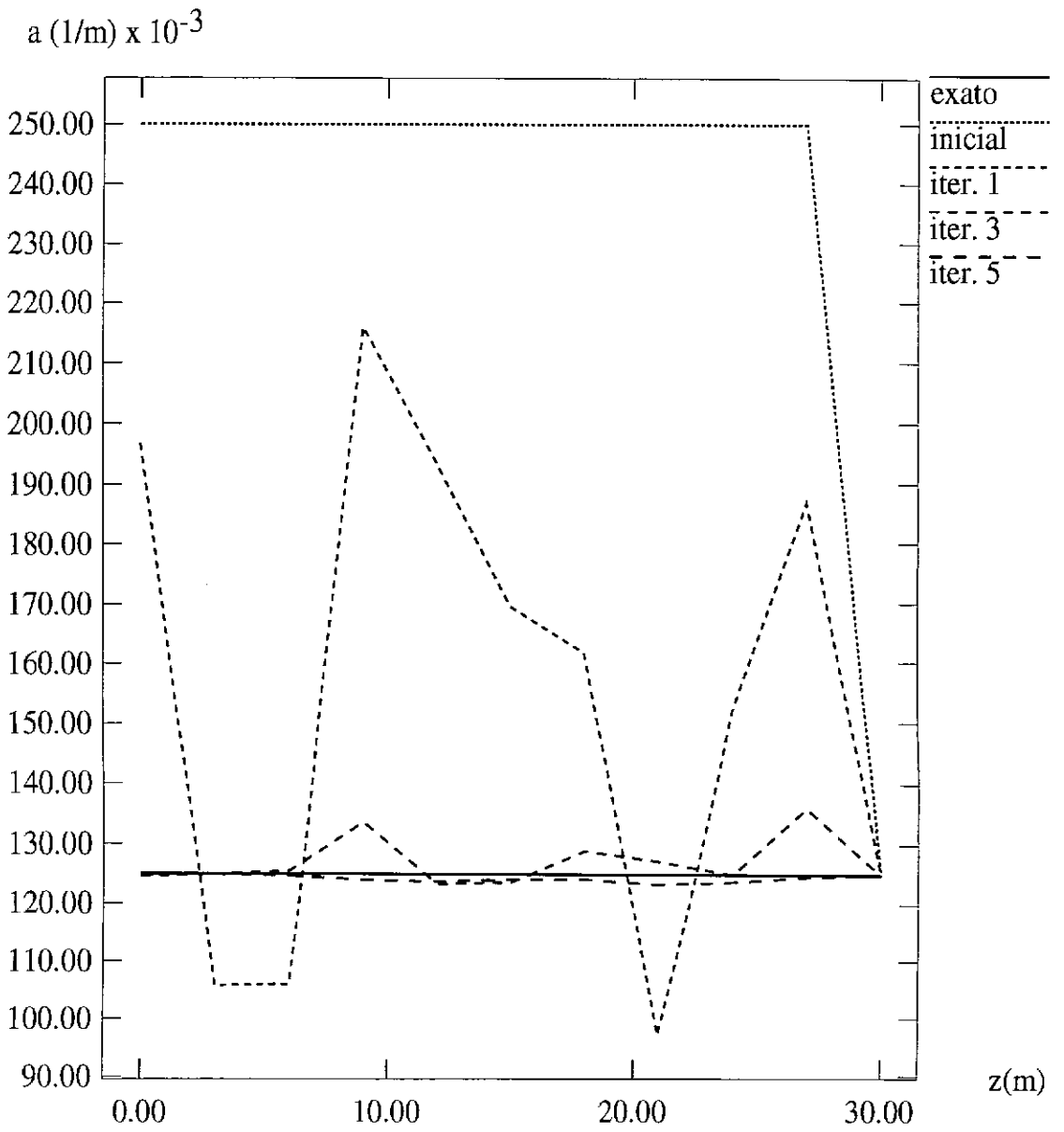


Fig. 5.21 - Estimativas sucessivas do perfil de absorção (2% de ruído, sem bioluminescência).

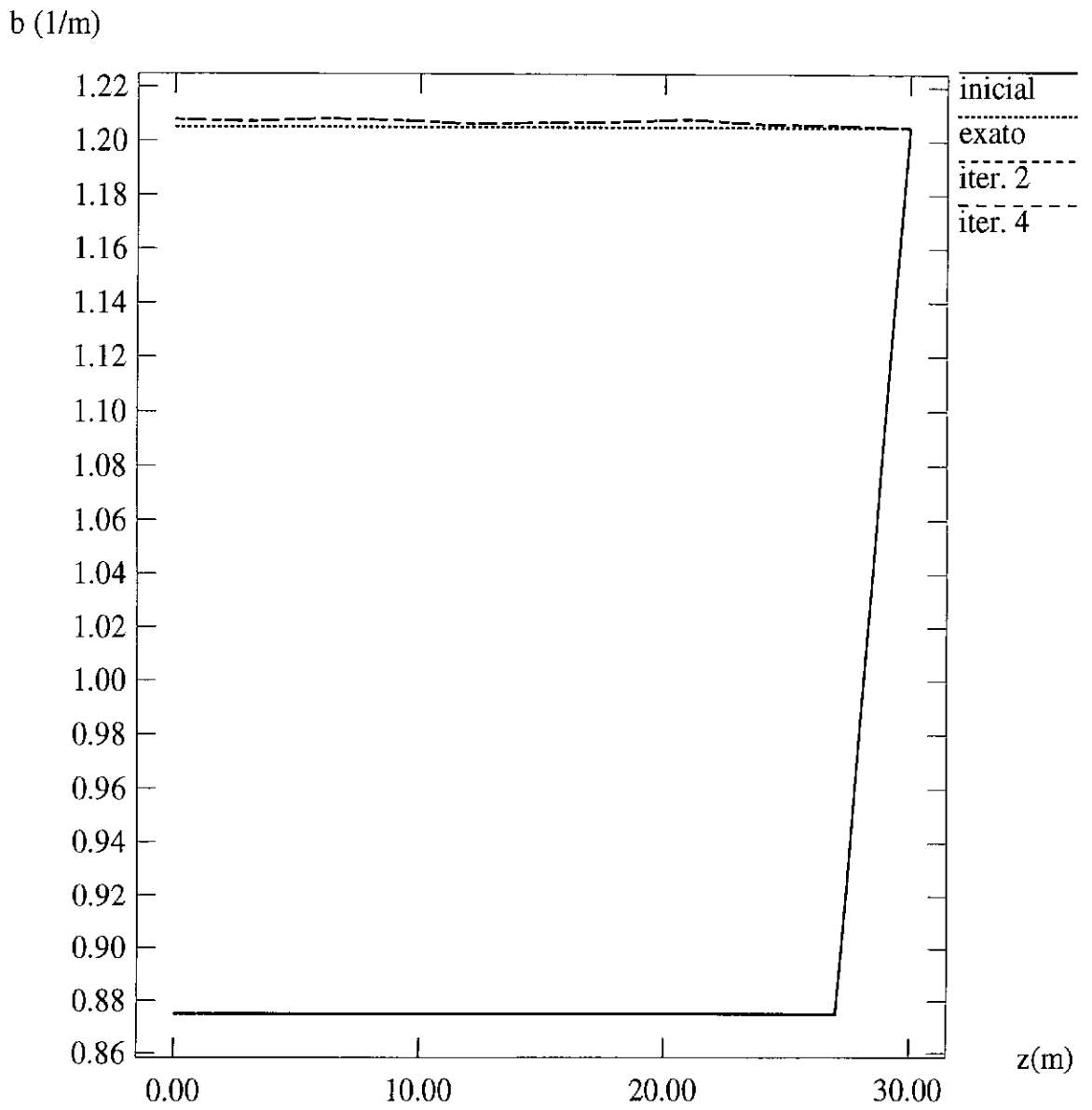


Fig. 5.22 - Estimações sucessivas do perfil de espalhamento (2% de ruído, sem bioluminescência).

5.5.3 Estimação Conjunta de Perfis Verticais e do Perfil de Bioluminescência com Ruído

Finalmente, apresenta-se um caso de estimação conjunta e *alternada* de perfis verticais *constantes* dos coeficientes de absorção e de espalhamento, **com** fontes de bioluminescência (53). Os dados sintéticos foram gerados para as mesmas condições do caso anterior (Seção 5.5.2), exceto pela presença de bioluminescência. Os perfis **constantes** de absorção e espalhamento a serem reconstruídos são os mesmos da seção anterior.

$$\begin{aligned} a(z) &= 0.125 \text{ m}^{-1} \\ b(z) &= 1.205 \text{ m}^{-1} \end{aligned}$$

As fontes gaussianas de bioluminescência a serem reconstruídas são as mesmas que foram utilizadas na Seção 5.5.1 e são dadas pelas intensidades q_k (unidades $Wm^{-2}sr^{-1}nm^{-1}$), onde $k = 1, 2, \dots, 10$:

$$\begin{aligned} q_4 &= 16.00 & (z_4 = 10.5 \text{ m}) \\ q_6 &= 5.12 & (z_6 = 16.5 \text{ m}) \\ q_k &= 0 & (k \neq 4, 6) \end{aligned}$$

Representam-se os perfis $a(z)$ e $b(z)$ por um conjunto discreto de $n = 11$ pontos igualmente espaçados, como na Seção 5.5.2, e o perfil de bioluminescência por um conjunto discreto de $m = 10$ intensidades q_l , como na Seção 5.5.1:

$$\begin{aligned} a_k, & \quad k = 1, 2, \dots, 11 \\ b_k, & \quad k = 1, 2, \dots, 11 \\ q_l, & \quad l = 1, 2, \dots, 10 \end{aligned}$$

Os limites e as estimativas iniciais para os parâmetros a_k e b_k (em m^{-1}) são os mesmos da seção anterior, e para os q_l (em $Wm^{-2}sr^{-1}nm^{-1}$), os mesmos da Seção 5.5.1:

$$\begin{aligned} 0.0 \leq a_k \leq 0.5 & \quad \text{e} \quad a_k^{(0)} = 0.250 \text{ m}^{-1} & (k = 1, 2, \dots, 11) \\ 0.5 \leq b_k \leq 2.4 & \quad \text{e} \quad b_k^{(0)} = 0.875 \text{ m}^{-1} & (k = 1, 2, \dots, 11) \\ 0.0 \leq q_l \leq 20.0 & \quad \text{e} \quad q_k^{(0)} = 0.0 & (l = 1, 2, \dots, 10) \end{aligned}$$

Segue-se a estratégia conjunta e alternada adotada:

- 1) Adotando-se $b_k = b_k^{(0)}$, e bioluminescência **nula**, estimar os parâmetros a_k ($N_p = 11$);
- 2) A partir desses resultados (a_k), e ainda com bioluminescência **nula**, estimar os parâmetros b_k ($N_p = 11$);
- 3) Assumindo-se os perfis dados pelos parâmetros a_k e b_k estimados nos passos anteriores, estimar o perfil de bioluminescência expresso pelos parâmetros q_l ($N_p = 10$ e desvio padrão $\sigma = 0.75$);

- 4) A partir dos b_k 's e q_l 's obtidos nos passos anteriores, re-estimar os a_k 's ($N_p = 11$);
- 5) A partir dos a_k 's e q_l 's obtidos anteriormente, re-estimar os b_k 's ($N_p = 11$);
- 6) Re-estimar os q_l 's, utilizando os novos a_k 's e b_k 's ($N_p = 10$ e $\sigma = 0.75$);
- 7) Repetir sucessivamente as estimações dos a_k 's, b_k 's e q_l 's e assim por diante enquanto o valor final obtido para a função objetivo for diminuindo;

Os resultados referentes aos a_k 's e b_k 's foram analisados através da função objetivo $J(\mathbf{p})$ definida na Equação 5.3 (Seção 5.5.2), ou seja, com regularização por máxima entropia pelo critério ST (Equação 3.15) e com a correção relativa à profundidade dada pelo fator $\sqrt{e^Z}$ (EXP , Equação 3.5). Os resultados referentes aos q_l 's foram analisados pelo valor final da função objetivo $J(\mathbf{p})$ definida na Equação 5.3 (Seção 5.5.1), ou seja, sem termo de regularização e sem fator de correção de profundidade.

A sequência alternada da estimação dos parâmetros a_k , b_k e q_l é apresentada a seguir, onde os índices superiores indicam o número da iteração e tem-se $k = 1, 2, \dots, 11$ e $l = 1, 2, \dots, 10$, nas iterações onde se aplicam. Os valores de $J(\mathbf{p})$ apresentados são os valores finais de cada iteração .

Iteração 1: estimar a_k a partir de $a_k^{(0)}$, assumindo-se $b_k = b_k^{(0)}$ e ausência de bioluminescência;

$$J^{(1)}(\mathbf{p}) = 0.01058247$$

Iteração 2: estimar b_k a partir de $b_k^{(0)}$, assumindo-se $a_k = a_k^{(1)}$ e ausência de bioluminescência;

$$J^{(2)}(\mathbf{p}) = 0.1739140 \times 10^{-6}$$

Iteração 3: estimar q_l a partir de $q_l^{(0)}$, assumindo-se $a_k = a_k^{(1)}$ e $b_k = b_k^{(2)}$;

$$J^{(3)}(\mathbf{p}) = 0.5180225 \times 10^{-2}$$

Iteração 4: estimar a_k a partir de $a_k^{(1)}$, assumindo-se $b_k = b_k^{(2)}$ e $q_l = q_l^{(3)}$;

$$J^{(4)}(\mathbf{p}) = 0.6570007 \times 10^{-6}$$

Iteração 5: estimar b_k a partir de $b_k^{(2)}$, assumindo-se $a_k = a_k^{(4)}$ e $q_l = q_l^{(3)}$;

$$J^{(5)}(\mathbf{p}) = 0.3955707 \times 10^{-8}$$

Iteração 6: estimar q_l a partir de $q_l^{(3)}$, assumindo-se $a_k = a_k^{(4)}$ e $b_k = b_k^{(5)}$;

$$J^{(6)}(\mathbf{p}) = 0.3342923 \times 10^{-2}$$

Iteração 7: estimar a_k a partir de $a_k^{(4)}$, assumindo-se $b_k = b_k^{(5)}$ e $q_l = q_l^{(6)}$;

$$J^{(7)}(\mathbf{p}) = 0.3883110 \times 10^{-7}$$

Iteração 8: estimar b_k a partir de $b_k^{(5)}$, assumindo-se $a_k = a_k^{(7)}$ e $q_l = q_l^{(6)}$;

$$J^{(8)}(\mathbf{p}) = 0.4227575 \times 10^{-9}$$

Observa-se que, neste problema, devem ser comparados os valores de $J(\mathbf{p})$ que foram calculados da mesma maneira, ou seja, pode-se apenas cotejar valores correspondentes a iterações de IOP's entre si, ou de iterações relativas à bioluminescência entre si (por exemplo $J^{(5)}(\mathbf{p})$ com $J^{(4)}(\mathbf{p})$, mas não com $J^{(3)}(\mathbf{p})$). Além disso, constatou-se, neste caso, ser adequado comparar valores de $J(\mathbf{p})$ relativos a estimações da mesma grandeza. Assim, a melhora nos resultados relativos ao espalhamento pode ser constatada comparando-se $J^{(8)}(\mathbf{p})$ com $J^{(5)}(\mathbf{p})$, a melhora relativa à absorção, comparando-se $J^{(7)}(\mathbf{p})$ com $J^{(4)}(\mathbf{p})$ e a relativa às fontes, comparando-se $J^{(6)}(\mathbf{p})$ com $J^{(3)}(\mathbf{p})$. De uma maneira semelhante ao caso da seção anterior, iterações subsequentes levaram a uma piora (aumento) do valor de $J(\mathbf{p})$, considerando-se como resultados finais os correspondentes às iterações 7 (absorção), 8 (espalhamento) e 6 (bioluminescência).

Na Figura 5.23 mostram-se os sucessivos perfis estimados $a(z)$'s, na Figura 5.24, os sucessivos perfis estimados $b(z)$'s e, finalmente, na Figura 5.25, os sucessivos perfis estimados de bioluminescência. Conclui-se que os resultados foram bons, tanto para os perfis de absorção e de espalhamento como para o perfil de bioluminescência.

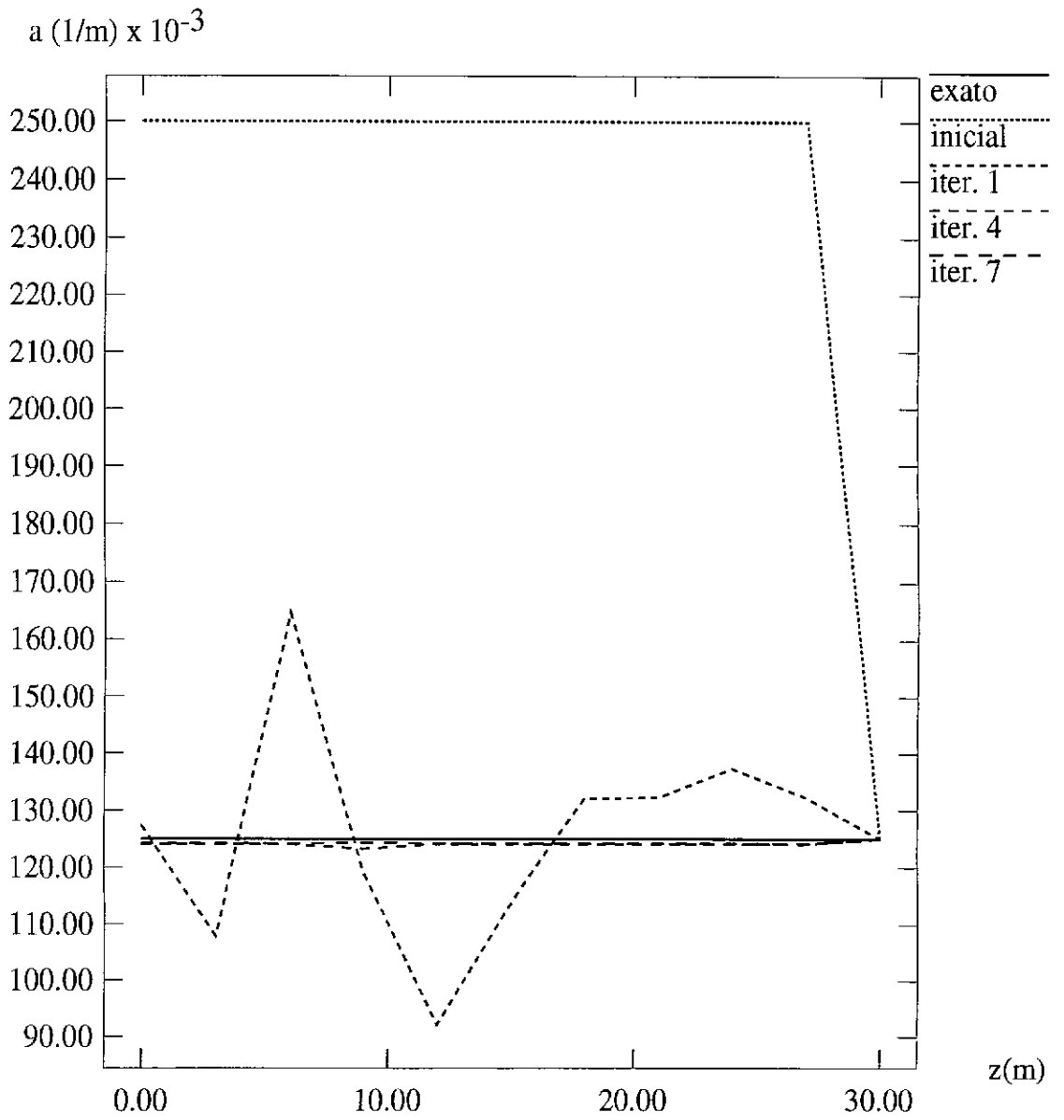


Fig. 5.23 - Estimações sucessivas do perfil de absorção (2% de ruído, com bioluminescência).

b (1/m)

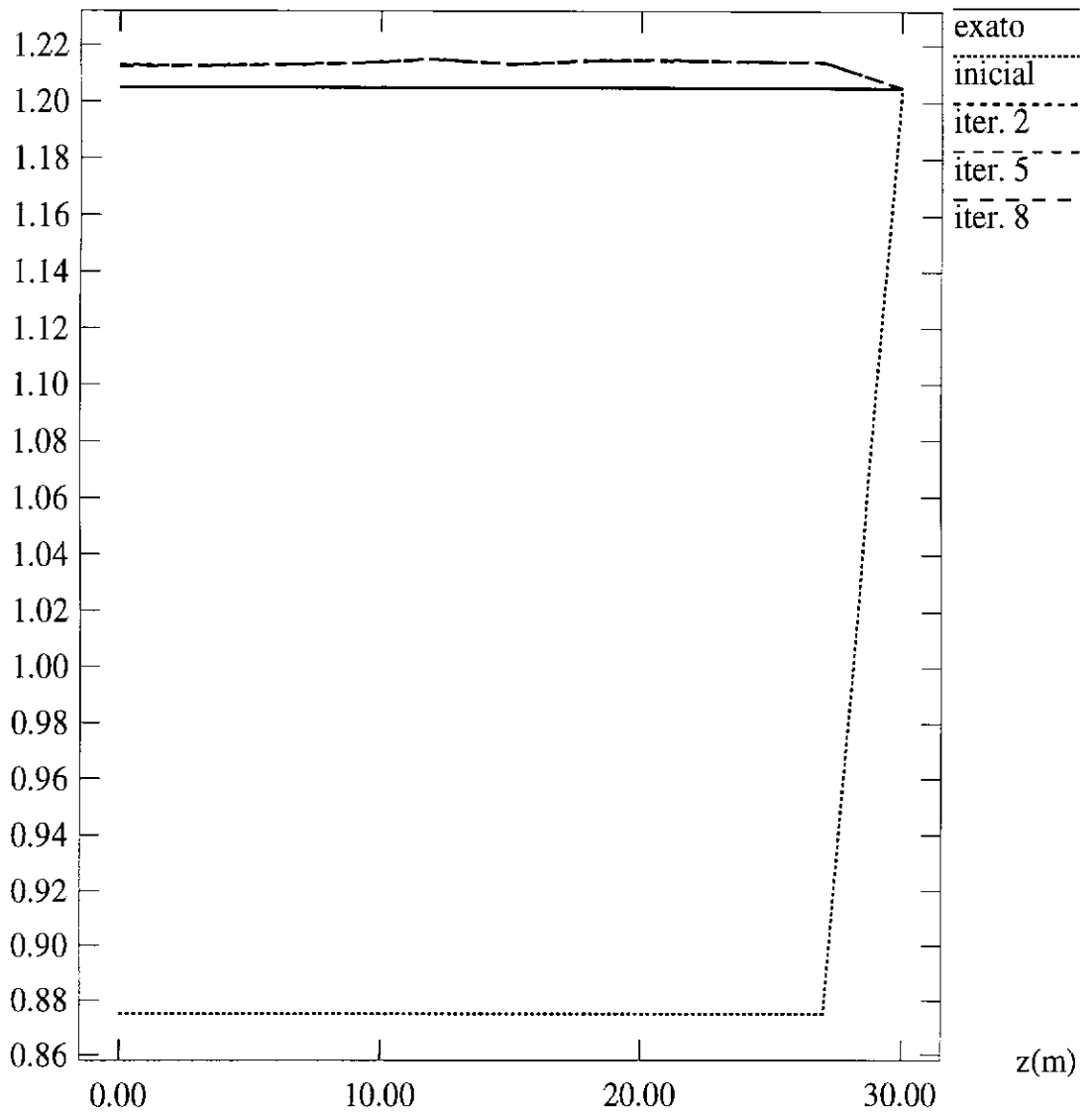


Fig. 5.24 - Estimações sucessivas do perfil de espalhamento (2% de ruído, com bioluminescência).

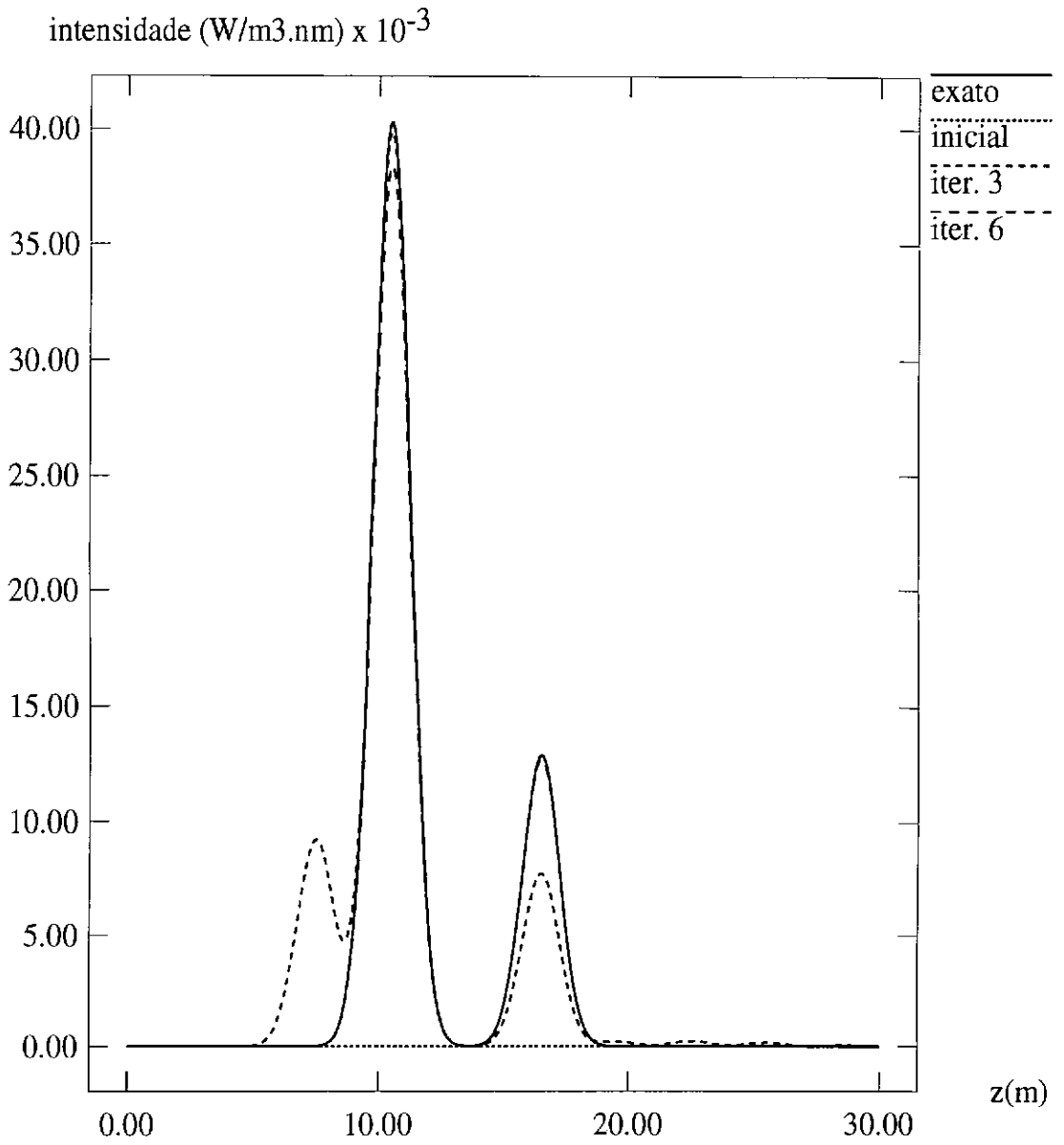


Fig. 5.25 - Estimativas sucessivas do perfil de bioluminescência (2% de ruído, com bioluminescência).

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS FINAIS

No presente trabalho, os resultados obtidos na estimação de fontes de bioluminescência e dos coeficientes de absorção a e de espalhamento b permitiram comprovar a *validade da metodologia de inversão adotada*, nos casos analisados. Foi possível determinar, para estes casos, quais seriam as melhores estratégias em termos do fator de correção relativo à profundidade e do critério de escolha do parâmetro de regularização na regularização por máxima entropia.

A utilização de dados *sintéticos*, ao invés de *experimentais*, permitiu avaliar o erro RMS e a precisão das soluções obtidas. Conforme o apresentado nos Capítulos 4 e 5, pode-se dizer que se obtiveram resultados *bons*, para os seguintes casos específicos analisados neste trabalho:

- estimação isolada do perfil de bioluminescência;
- estimação isolada de perfil *constante* $a(z)$;
- estimação isolada de perfil *gaussiano* $a(z)$;
- estimação isolada de perfil *constante* $b(z)$;
- estimação conjunta dos valores únicos de a e b e do perfil de bioluminescência;
- estimação conjunta de perfis *constantes* $a(z)$ e $b(z)$;
- estimação conjunta de perfis *constantes* $a(z)$ e $b(z)$ e do perfil de bioluminescência.

Os resultados não foram bons na estimação do perfil *gaussiano* $b(z)$, embora as soluções encontradas constituam aproximações bastante razoáveis. Quase todos os casos foram testados sem ruído e também com ruído gaussiano de 2% nos dados, embora as estimações conjuntas de perfis constantes tenham somente sido testadas com ruído.

Observou-se no Capítulo 4, que, uma vez conhecidos a e b com razoável grau de precisão, a reconstrução de perfis verticais de bioluminescência, nos casos analisados, é obtida com relativa facilidade, o que pode ser explicado pela forte correlação espacial entre as fontes de bioluminescência e as irradiâncias experimentais. Isto pode ser observado nos perfis verticais de irradiâncias, com e sem fontes mostrados no Capítulo 4, onde facilmente se identificam as profundidades correspondentes à presença destas fontes. Validou-se também o modelo adotado para

as fontes, no qual o perfil de bioluminescência é representado por uma combinação linear de distribuições gaussianas de mesmo desvio padrão.

A estimação do perfil de $a(z)$ é também efetiva, pois como comentado na Seção 3.2.1, a absorção é o fator dominante na atenuação do feixe luminoso propagando-se na água. Já a estimação do perfil $b(z)$ mostrou-se mais difícil, no sentido do problema ser pior *condicionado*, uma vez que a determinação desta grandeza parece ser extremamente suscetível à presença de ruído nos dados e aos erros de arredondamento numérico.

A estimação de perfis $a(z)$ ou $b(z)$ apresenta erros em profundidades maiores, devido à pouca disponibilidade de informação, causada pelo comportamento assintótico das curvas de irradiâncias, as quais tendem a zero, como pode ser visto nas Figuras 4.1 e 4.2. Estimações de $a(z)$ e $b(z)$ mostraram a necessidade do uso de um **fator de correção relativo à profundidade** (veja-se novamente Seção 3.2.1). Para perfis de absorção, ambos os fatores utilizados (*EXP* e *BBL*, este último proposto neste trabalho) deram bons resultados. No entanto, parece ser discutível o uso de tais fatores nas estimações do perfil de espalhamento (com exceção de um caso citado adiante), especialmente quando se tratam de perfis variáveis, pois causam instabilidades na solução. Um fator apropriado de correção relativa à profundidade para estimação de perfis verticais $b(z)$ deverá ser objeto de estudos futuros.

Um outro enfoque possível para diminuir os erros nas profundidades menores, como sugerido em (5), seria aumentar o domínio espacial relativo aos dados experimentais para melhorar a estimação de perfis nos pontos onde há menos informação disponível. Devido ao sentido dominante de propagação da luz, no caso da superfície para o fundo, há informação sobre as características das regiões próximas da superfície em todas as profundidades. No entanto, a informação sobre as regiões inferiores do perfil está praticamente concentrada nos dados situados nas profundidades maiores. No caso da estimação do perfil de espalhamento, poder-se-ia obter melhores resultados estendendo a faixa de medidas para profundidades além do nível mínimo que se deseja estimar.

Outro ponto importante refere-se ao critério de escolha do **parâmetro de regularização**. Este trabalho fez uso da *regularização por máxima entropia*, conforme definido nas Seções 3.3.2 e 3.3.3 e, de maneira geral, utilizaram-se os critérios de *tentativa-e-erro* e de Sena e Toksöz para escolha do parâmetro de regularização. Nos casos de estimação de perfis *constantes*, de absorção ou espalhamento, o critério proposto por Sena e Toksöz mostrou-se muito eficiente, uma vez que leva a “achatar” o perfil a ser estimado. Nesses casos, cabe a observação de que se empregou o fator de correção relativo à profundidade na estimação da absorção, enquanto que na estimação do espalhamento, o uso desse fator foi indiferente. Essa tendência de “achatamento” sugere que aplicação do critério Sena e Toksöz para perfis variáveis poderia não levar à solução exata, mas a uma aproximação razoável, que constitui uma espécie de “valor médio” para o perfil estimado (como constatado em alguns casos). No tocante à estimação de fontes, como citado no Capítulo 4, a modelagem

do perfil de bioluminescência por uma combinação de distribuições gaussianas leva a prescindir, nos casos testados, da regularização, uma vez que o perfil assim gerado é inerentemente suave.

De maneira geral, os resultados foram melhores que os obtidos por Tao, McCormick e Sanchez em (58), trabalho no qual o algoritmo utilizado baseia-se na Equação 3.1 e os dados observados são constituídos pelo conjunto de irradiâncias E_u , E_d , E_{0u} e E_{0d} em várias profundidades. Apesar da utilização de dados sem ruído, a metodologia proposta no trabalho acima referido, que consiste em estimar conjunta e *simultaneamente* os perfis constantes de absorção e espalhamento e o perfil de bioluminescência não foi bem sucedida.

Em contraposição, no presente trabalho, conseguiram-se bons resultados (mesmo para dados com ruído) para o problema abordado em (58), graças à metodologia adotada, ou seja:

- formulação do problema como um problema de otimização não-linear;
- estratégia de estimação conjunta e *alternada* dos perfis de absorção, espalhamento e bioluminescência;
- função de regularização entrópica;
- modelagem das fontes de bioluminescência por combinação de distribuições gaussianas.

Assim, uma vez que perfis variáveis $a(z)$ e $b(z)$ puderam ser reconstruídos isoladamente, presume-se que a estimação conjunta de perfis variáveis de a , b e bioluminescência possa ser alcançada com sucesso, uma vez que seja aperfeiçoada a estimação de perfis $b(z)$. Isto permitiria avaliar a metodologia proposta através da utilização de dados *experimentais*, ao invés dos *sintéticos*.

Cita-se um outro aspecto, bastante comum: o desempenho, em termos de tempo de processamento, que dificulta a experimentação de novos casos e o aperfeiçoamento da metodologia. Tem-se, tipicamente, um número de iterações alto (na faixa 500 – 1000) e um tempo médio por iteração de 3 minutos, numa estação de trabalho Digital Alpha Sable 2100/200. Vislumbram-se, além da solução óbvia de se utilizar máquinas mais velozes, algumas possibilidades de se acelerar a resolução dos problemas inversos propostos:

- otimização ou substituição das rotinas para resolução das equações de Riccati (43), no código *Hydrolight* 3.0;
- otimização no cálculo dos gradientes do vetor de parâmetros, que é feito pelo método das diferenças finitas, na rotina E04UCF da biblioteca *NAG*; esta rotina permite que o usuário forneça uma rotina alternativa para o referido cálculo e poderia se utilizar uma aproximação mais conveniente, em termos de tempo de processamento;

- uso de algoritmos de otimização não-clássicos, como os citados no Capítulo 3, em substituição à rotina de otimização acima citada.

O último destes itens parece ser o que oferece um campo mais vasto de alternativas, pois poderia levar a atacar de maneira mais eficiente um problema fundamental (em termos de métodos de inversão implícitos), que é a busca de novas soluções candidatas.

Quando se cogita a respeito de aplicações práticas, as dificuldades a serem enfrentadas se multiplicam, pois a disponibilidade de informação diminui. Podem-se citar:

- estimação de parâmetros (a , b ou fontes) a partir de dados *in situ* compostos não mais por irradiâncias medidas em várias profundidades (z_i , $i = 1, 2, \dots, N_z$), mas através de medidas na superfície da *reflectância espectral de irradiância* (R , Equação 2.4) ou da *reflectância espectral de sensoriamento remoto* (R_{RS} , Equação 2.5);
- estimação **remota** de parâmetros a partir de dados de sensoriamento remoto, relativos a essas reflectâncias.

Certamente, aplicações em sensoriamento remoto constituem campo relativamente novo, em Ótica Hidrológica, e de grande interesse, mas as dificuldades a serem enfrentadas são muitas. Deve-se estimar a radiação emitida pela água através da radiação recebida pelos sensores de um satélite, a qual inclui também a radiação refletida pela superfície da água e a radiação espalhada pelos gases e aerossóis atmosféricos. Para modelar a propagação da radiação emitida pela água através da atmosfera, deve-se resolver a equação de transferência radiativa *para a atmosfera*, considerando a posição do Sol e dos sensores do satélite, estimativas da natureza e distribuição atmosférica dos aerossóis, etc. Estima-se que menos de 10% da radiação detectada no satélite seja proveniente da radiação que efetivamente saiu da água (33).

Como exemplo de aplicação em sensoriamento remoto, tem-se a estimação remota multi-espectral da concentração de clorofila no mar (33) (21). A alteração do espectro de luz solar na radiação emitida pela água depende da concentração de clorofila. Dispondo-se de um satélite com um instrumento como o CZCS (Coastal Zone Color Scanner), com 4 canais no espectro visível para medida de radiâncias, podem-se obter *razões* entre radiâncias emitidas pelas água para diferentes canais. Conhecem-se curvas que relacionam essas razões com a concentração de clorofila, por exemplo, o logaritmo da concentração com o logaritmo de uma dada razão. Assim, dispondo-se das medidas de radiâncias em cada canal, podem-se estimar as radiâncias emitidas pela água e calcular as razões e correcioná-las com a concentração de clorofila.

Certamente pode-se vislumbrar a possibilidade de se desenvolver uma metodologia para estimar parâmetros tais como propriedades óticas de águas naturais a partir de dados de sensoriamento remoto, mas no atual *status quo* parece ser precoce afirmar sua viabilidade.

A título de uma proposta mais imediata e simples, sugere-se uma metodologia para estimação multi-espectral de fontes de bioluminescência, a partir de dados *in situ* na superfície da água (não se dispoñdo mais de dados em diversas profundidades, como nos exemplos deste trabalho). Ao invés das irradiâncias, seriam utilizadas as reflectâncias espectrais de sensoriamento remoto R_{RS} em diversas frequências e para $\theta = \pi$, ou seja, na direção vertical e para cima. Uma faixa espectral típica para bioluminescência seria de 20 nm, dividida em 5 ou 10 intervalos. R_{RS} relaciona a radiação incidente na água com aquela que foi emitida de volta para a atmosfera. Essa grandeza é comumente utilizada e pode ser medida com um radiômetro, de maneira relativamente simples.

No problema proposto, a função objetivo, mostrada aqui sem o termo de regularização, seria dada por:

$$J(\mathbf{p}) = R(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N_\lambda} R_i(\mathbf{p}),$$

onde N_λ é o número de frequências consideradas.

$$R_i(\mathbf{p}) = \left[R_{RS,\lambda_i}^{\text{exp}} - R_{RS,\lambda_i}^{\text{p}} \right]^2.$$

$R(\mathbf{p})$ representa a soma dos quadrados das diferenças entre os dados gerados para a solução candidata e os experimentais, enquanto que R_{RS,λ_i} denota a reflectâncias espectral de sensoriamento remoto para $\theta = \pi$ e $\lambda = \lambda_i$. Observa-se que a extensão dessa proposta para sensoriamento remoto seria mais difícil, pois no momento não se dispõe de satélites com essa resolução espectral.

Finalmente, sugere-se, para estimação de perfis de propriedades óticas, a colocação de uma fontes de luz artificial numa profundidade determinada e a realização de medidas *in situ* em diversas profundidades.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- (1) Barichello, L.B. *Formulação analítica para solução do problema de ordenada discreta unidimensional*. (Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica) - PROMEC/UFRGS, 1992.
- (2) Barichello L.B.; Vilhena, M.T. Um problema inverso em transporte de neutrons e radiação. In: Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica, 9., 1993. *Anais*. 1993a, p. 90-92.
- (3) Barichello L.B.; Vilhena, M.T. A general approach to one group one dimensional transport equation. *Kerntechnik*, (58):182-184, 1993b.
- (4) Barichello, L.B.; Garcia, R.D.M.; Siewert, C.E. On inverse boundary-condition problems in radiative transfer. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 57 (3):405-410, 1997.
- (5) Beck J.V.; Blackwell B.; St. Clair Jr., C.A. *Inverse heat conduction*. New York, John Wiley & Sons, 1985.
- (6) Bell, G.I.; Glasstone, S. *Nuclear reactor theory*. Huntington, USA, Robert E. Krieger Publishing, 1979.
- (7) Benassi, M.; Garcia, R.D.M.; Karp, A.H.; Siewert, C.E. A high-order spherical-harmonics solution to the standard problem in radiative transfer. *Astrophysics Journal*, 280:853-864, 1984.
- (8) Campos Velho, H.F.; Claeysen, J.C.R. A non-modal approach for time-integration of a barotropic limited area model. *Computers & Mathematics with Applications*, 33 (9):1-13, 1997.
- (9) Case, K.M. Elementary solutions of the transport equation and their applications. *Annals of Physics*, (9):1-23, 1960.
- (10) Case, K.M.; Zweifel, P.F. *Linear transport theory*. New York, Addison-Wesley Publishing, 1967.
- (11) Chandrasekhar, S. *Radiative transfer*. New York, Dover, 1950.
- (12) Claeysen, J.C.R. On predicting the response of non-conservative linear vibrating systems by using dynamical matrix solution. *Journal of Sound and Vibration*, 140 (1):73-84, 1990.
- (13) Davison, B. *Neutron transport theory*. New York, Oxford University Press, 1958.

- (14) DeGroot-Hedlin, C.; Constable, S. Occam's inversion to generate smooth, two-dimensional models from magnetotelluric data. *Geophysics* 55 (12):1613-1624, 1990.
- (15) Digital Equipment. *DEC Fortran: user manual for open VMS AXP systems*. USA, 1992a.
- (16) Digital Equipment. *DEC Fortran - language reference manual*. USA, 1992b.
- (17) Duderstadt, J.J.; Martin, W.R. *Transport theory*. New York, John Wiley & Sons, 1979.
- (18) Galante, M. Genetic algorithms as an approach to optimize real-world trusses. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 39:361-382, 1996.
- (19) Garcia, R.D.M.; Siewert, C.E.; Thomas Jr., J.R. The classical spherical harmonics method in transport theory. *Transactions of American Nuclear Society*, 71:220-222, 1994.
- (20) Gordon, H.R. Remote sensing marine bioluminescence: the role of the in-water scalar irradiance. *Applied Optics*, 23 (11):1694-1696, 1984.
- (21) Gordon, H.R.; Brown, O.B.; Evans, R.E.; Brown, J.W.; Smith, R.C.; Baker, K.S.; Clark, D.C. A semianalytic model of ocean color. *Journal of Geophysics Research*, 93 (D9):1090-1099, 1988.
- (22) Gordon, H.R. Can the Lambert-Beer law be applied to the diffuse attenuation coefficient of ocean water? *Limnology and Oceanography*, 34 (8):1389-1409, 1989.
- (23) Gull, S.F.; Daniell, G.J. Image reconstruction from incomplete and noisy data. *Nature*, 272:686-690, 1978.
- (24) Ishimaru, A. *Wave propagation and scattering in random media*. New York, Academic Press, 1978, v.1.
- (25) Jaynes, E.T. Information theory and statistical mechanics. *Physical Review*, 106:620-630, 1957.
- (26) Kourganoff, V. *Basic methods in transfer problems*. New York, Oxford Univ. Press, 1952.
- (27) Larsen, E. W. The inverse source problem in radiative transfer. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, (15):1-5, 1975.
- (28) Liou, Kuo-Nan. *An Introduction to atmospheric radiation*. New York, Academic Press, 1980.

- (29) McCormick, N.J.; Kuščer, I. Singular eigenfunction expansions in neutron transport theory. *Advances in Nuclear Science and Technology*, (7):181–282, 1973.
- (30) McCormick, N.J. Inverse radiative transfer problems: a review. *Nuclear Science and Engineering*, 112:185–198, 1992.
- (31) Mobley, C.D. A numerical model for the computation of radiance distributions in natural waters with wind-roughened surfaces. *Limnology and Oceanography*, 34 (8):1473–1483, 1989.
- (32) Mobley, C.D.; Gentili, B.; Gordon, H.R.; Jin, Z.; Kattawar, G.W.; Morel, A.; Reinersman, P.; Stammes, K; Stavn, R.H. Comparison of numerical models for computing underwater light fields. *Applied Optics*, 32 (36):7484–7504, 1993.
- (33) Mobley, C.D. *Light and water - radiative transfer in natural waters*. San Diego, USA, Academic Press, 1994.
- (34) Mobley, C.D. *Hydrolight 3.0 user's guide*. Menlo Park, USA, SRI International, 1995.
- (35) Morozov V.A. *Regularization methods for ill-posed problems*. Boca Raton, USA, CRC Press, 1993.
- (36) Mullikin, T.W. Wiener-Hopf factorizations. *Transport Theory and Statistical Physics*, 3 (3):215–227, 1973.
- (37) NAG. *NAG Fortran library mark 16*. Oxford, UK, 1993.
- (38) Oliveira, P.P.B.; Ramos, F.M.; Gatto, R.C.; Campos Velho, H.F; Stephany, S.; Navarro, P.L.K.G.; Husbands, P.; Harvey, I. A research agenda for iterative approaches to inverse problems using evolutionary computation. In: IEEE International Conference on Evolutionary Computing, Nagoya, Japão, 1996. *Proceedings*. Piscataway, NJ, IEEE Press, 1996, p. 55–60.
- (39) Phillips, D.L. A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind. *Journal of A.C.M.*, (9):85–97, 1962.
- (40) Preisendorfer, R.W. Generalized invariant imbedding relation. *Proceedings of the National Academy of Science*, 47 (4):591–594, 1961.
- (41) Preisendorfer, R.W. *Hydrologic Optics: Imbeddings*. Springfield, USA, 1976, v.4. (NTIS PB-259 796/1ST).
- (42) Preisendorfer, R.W.; Mobley, C.D. Theory of fluorescent irradiance fields in natural water. *Journal of Geophysics Research*, 93 (D0):10831–10855, 1988.

- (43) Press, W.H.; Flannery, B.P.; Teukolsky, S.A.; Vetterling, W.T. *Numerical recipes*. New York, Cambridge University Press, 1989.
- (44) Ramos, F.M.; Giovannini, A. Résolution d'un problème inverse multidimensionnel de diffusion de la chaleur par la méthode des éléments analytiques et par le principe de l'entropie maximale. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, (38):101-111, 1995.
- (45) Ramos, F.M.; Campos Velho, H.F. Reconstruction of geoelectric conductivity distributions using a first-order minimum entropy technique. In: International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice, 2., Le Croisic, França, 1996. *Proceedings*. França, 1996, v.2, p. 199-206.
- (46) Raudenský, M.; Woodbury, K.A.; Kral, J.; Brezina, T. Genetic algorithm in solution of inverse heat conduction problems. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 28:293-306, 1995.
- (47) Segatto, C.F.; Vilhena, M.T. Extension of the LTSn formulation for discrete ordinates problem without azimuthal symmetry. *Annals of Nuclear Energy*, 21:701-710, 1994.
- (48) Segatto, C.F. *Extensão da formulação LTSn para problemas de transporte sem simetria azimutal e problemas dependentes do tempo*. (Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica) - PROMEC/UFRGS, 1995.
- (49) Sena, A.G.; Toksöz, M.N. Simultaneous reconstruction of permittivity and conductivity for crosshole geometries. *Geophysics*, 55 (10):1302-1311, 1990.
- (50) Shannon, C.E.; Weaver, W. *The mathematical theory of communication*. Urbana, USA, University of Illinois Press, 1949.
- (51) Silva Neto, A.J.; Özisik, M. N. An inverse heat conduction problem of estimating initial condition. In: Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 12., 1993. *Anais*. 1993, p. 613-616.
- (52) Sobolev, V.V. *A Treatise on radiative transfer*. Lexington, USA, D. Van Nostrand, 1962.
- (53) Stephany, S.; Campos Velho, H.F.; Ramos, F.M.; Mobley, C.D. Estimating absorption and scattering coefficients and internal source term in a radiative transfer process. [CD-ROM]. In: Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 14., 1997. *Anais*. COBEM, 1997.
- (54) Stephany, S.; Ramos, F.M.; Campos Velho, H.F.; Mobley, C.D. Reconstruction of bioluminescence sources in natural waters. In: Atluri, S.N.; Yagawa, G., ed. *Advances in Computational Engineering Science*. USA, Tech Science Press, 1997a, p. 447-452. International Conference on Computational Engineering Science, San Jose, Costa Rica, 1997.

- (55) Stephany, S.; Ramos, F.M.; Campos Velho, H.F.; Mobley, C.D. Estimation of inherent optical properties for natural waters. In: Italian-Latinamerican Conference on Applied and Industrial Mathematics, 2., Roma, Itália, 1997. *Proceedings*. Roma, Società Italiana di Matematica Applicata e Industriale, 1997b, p.230 (Quaderno CNR/GNFM n. 53).
- (56) Szu, H.; Hartley, R. Fast simulated annealing. *Physics Letters A*, 122:157–162, 1987.
- (57) Tanaka, Y.; Ishiguro, A.; Uchikawa, Y. A method of estimation of current distribution using genetic algorithms with variable-length chromosomes. *International Journal of Applied Eletromagnetics in Materials*, 4:351–356, 1994.
- (58) Tao, Z.; McCormick, N.J.; Sanchez, R. Ocean source and optical property estimation from explicit and implicit algorithms. *Applied Optics*, 33 (15):3265–3275, 1994.
- (59) Tarantola, A. *Inverse problems: methods for data fitting and model parameter estimation*. Amsterdam, Elsevier, 1988.
- (60) Tikhonov, A.N. Sur la régularisation de problèmes mal posés. *Rapports de l'Académie des Sciences de l'URSS*, 153 (1), 1963.
- (61) Tikhonov, A. N.; Arsenin, V. Y. *Solutions of ill-posed problems*. Washington, V. H. Winston & Sons, 1977.
- (62) Twomey, S. *Introduction to the mathematics of inversion in remote sensing and indirect measurements*. Amsterdam, Elsevier, 1977.
- (63) Vilhena, M.T.; Barichello, L.B. A new analytical approach to solve the neutron transport equation. *Kerntechnik*, 56:334–336, 1991.
- (64) Vilhena, M.T.; Barichello, L.B. A new analytical solution for the multigroup slab geometry discrete ordinates problem. *Transport Theory and Statistical Physics*, 24:1337–1352, 1995.
- (65) Vilhena, M.T.; Segatto, C.F.; Barichello, L.B. A particular solution for the Sn radiative transfer problems. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 53:467–469, 1995.
- (66) Williams, M.M.R. The Wiener-Hopf technique: an alternative to the singular eigenfunction method. *Advances in Nuclear Science and Technology*, (7):283–327, 1973.
- (67) Wood, J. *Computational methods in reactor shielding*. New York, Pergamon Press, 1982.

- (68) Woodbury, K.A. *What are inverse problems?* [on line].
<http://www.me.ua.edu/inverse/whatis.html>, 1995.
- (69) Yi, H.C.; Sanchez, R.; McCormick, N.J. Bioluminescence estimation from ocean *in situ* irradiances. *Applied Optics*, 31 (6):822–830, 1992.
- (70) Zabadal, J.; Vilhena, M.T.; Barichello, L.B. Solution of the three-dimensional one group discrete ordinates problem by the LTSn method. *Annals of Nuclear Energy*, 22:131–134, 1995.