AVALIAÇÃO DOS MODELOS SEMI-ANÁLÍTICOS QAA-v6 E QAA-E PARA ESTIMATIVA DO COEFICIENTE DE ABSORÇÃO $a_{CDOM(440)}$ NA REPRESA BILLINGS

Pedro Ferrini Manhães Bacellar[1], Daniel Andrade Maciel[1], Claudio Clemente Faria Barbosa[1], Qian Yu[2], Júlio dos Santos Pimenta[1], Rejane de Souza Paulino[3], Evlyn Marcia Leão de Moraes Novo[1]

[1]Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), São José dos Campos/SP, Brasil, pedro.bacellar@inpe.br, damaciel_maciel@hotmail.com, claudio.barbosa@inpe.br, julio.santos@inpe.br, evlyn.novo@inpe.
[2]Departament of Earth, Geographic and Climate Sciences, University of Massachusetts, Amherst, MA, USA, qyu@umass.edu
[3]Department of Agricultural and Biological Engineering, Mississippi State University, Starkville, MS, USA, rdp282@msstate.edu

RESUMO

O sensoriamento remoto da qualidade da água, permite identificar a dinâmica da Matéria Orgânica Dissolvida Colorida (CDOM) em extensos sistemas aquáticos continentais. Para isto, as Propriedades Ópticas Inerentes (POIs) precisam ser estimadas para o corpo hídrico por meio de modelos bio-ópticos. Estes modelos sendo calibrados para o ambiente de estudo, permitem recuperar as POIs partir de dados de R_{rs}. Neste trabalho foi realizada a avaliação de desempenho dos algoritmos QAA-v6 e QAA-E em conjunto para recuperar o Coeficiente de Absorção a_{CDOM}. O QAA-v6 foi utilizado para derivar absorção total (a_t) e retroespalhamento total (b_{bp}), e QAA-E foi utilizado para derivar a_{CDOM} a partir de $b_{bp}(555)$. O desempenho modelo não atingiu níveis satisfatórios (R^2 = 0.03, MAPE = 60%), no entanto estabeleceu uma linha de base para condução de parametrizações das etapas empíricas desta pesquisa. Futuras investigações serão conduzidas para ajustar um modelo para recuperar a_{CDOM} em reservatórios eutróficos.

Palavras-chave - CDOM, Qualidade da água, Modelo semi-analítico

ABSTRACT

Remote sensing of water quality enables the identification of Colored Dissolved Organic Matter (CDOM) dynamics in extensive continental aquatic systems. For this, the Inherent Optical Properties (IOPs) need to be estimated for the water body through bio-optical models. These models, calibrated for the study environment, allow the recovery of IOPs from Rrs data. In this work, the performance of the QAA-v6 and QAA-E algorithms was evaluated together to retrieve the CDOM Absorption Coefficient (a_{CDOM}). The QAA-v6 was used to derive total absorption (a_t) and total backscattering (b_{bp}), and QAA-E was used to derive a_{CDOM} from $b_{bp}(555)$. The model's performance did not reach satisfactory levels (R^2 = 0.03, MAPE = 60%), but it established a baseline for empirical parameterization stages in this research. Future investigations will aim to adjust a model to recover a_{CDOM} in eutrophic reservoirs.

Key words - *Water quality, CDOM, Semi-analitical Model*

1. INTRODUÇÃO

A Matéria Orgânica é constituída por um conjunto complexo de substâncias em vários estágios de degradação derivados da decomposição de tecidos animais, vegetais e da atividade de síntese de microrganismos. Em ecossistemas aquáticos continentais, a matéria orgânica dissolvida desempenha um papel ecológico fundamental e está envolvida em todos os níveis da cadeia trófica [12]. A fração que interage com a Radiação Eletromagnética (REM) é denominada *Colored Dissolved Organic Matter* - CDOM. Esta fração cromófora, é caracterizada pelo decaimento exponencial da absorção espectral nos comprimentos de onda (λ) da região do ultravioleta ao visível. Como consequência, ocorre a mudança na cor da água e redução da profundidade da zona eufótica, protegendo a biota aquática dos danos causados pela radiação UV-B. Desta maneira, a compreensão das dinâmicas do CDOM permite novos *insights* sobre variáveis ambientais relacionadas à disponibilidade de nutrientes e à ecologia em ambiente aquático.

Neste contexto, os dados coletados por sensoriamento remoto permitem o desenvolvimento de algoritmos bio-ópticos para realização de estimativa dos parâmetros de qualidade da água para extensos corpos d'água [4][1]. Estas estimativas baseiam-se na variação do campo de luz na coluna d'água, como resultado dos processos de absorção e espalhamento da REM ao interagir com os Constituintes Opticamente Ativos (COAs) da água [6]. Com isto, as imagens adquiridas a partir de plataformas orbitais viabilizam a análise temporal e automatizada das condições do estado trófico da água a partir de uma visão sinóptica, o que permite determinar a distribuição espacial de constituintes como CDOM, Clorofila, Ficocianina e Totais de Sólidos em Suspensão.

Os algoritmos empíricos focados na estimativa de absorção por CDOM, estabelecem relações estatística bi ou multivariadas entre Refletância de Sensoriamento Remoto $R_{rs}(\theta,\varphi,\lambda)(sr^{-1})$ e medidas do Coeficiente de Absorção a_{CDOM} (m^{-1}) em 440 nm. Já as estimativas baseadas em algoritmos semi ou quasi-analíticos incorporam Propriedades Ópticas Inerentes ao meio físico e se utilizam de soluções simplificadas da Equação de Transferência Radiativa (ETR)

para determinar parâmetros biogeofísicos [8][1]. Apesar de sua complexidade, a modelagem semi-analítica confere altos níveis de correlação e variabilidade sazonal e temporal com aplicabilidade em vários tipos de complexidade bio-optica e uma extensa abrangência espacial [7][9].

O objetivo do presente trabalho é testar e avaliar o desempenho dos modelos semi-analíticos *Quasi-Analytical Algorithm* QAA-v6 [7] e *Quasi-Analytical Algorithm Extended* QAA-E [15] os quais combinados permitem estimar a_{CDOM} (440). Os algoritmos foram testados a partir de seus parâmetros originais para identificar melhores estratégias de re-parametrização.

2. MATERIAL E MÉTODOS

A Represa Billings, está localizada na Região Metropolitana de São Paulo e possui uma área útil de 127 km², volume de 1,1 x 10^9 m³, profundidade máxima de 19 m e tempo de retenção da água de 880 dias. O reservatório possui importância estratégica para o abastecimento público e o controle de inundações na região [13]. As principais fontes de poluição de origem antrópica no reservatório estão localizadas próximo de Diadema, na Figura 1 e consistem no bombeamento do Rio Pinheiros (para controle de enchentes) e na ocupação humana próxima às margens da barragem [5][3].

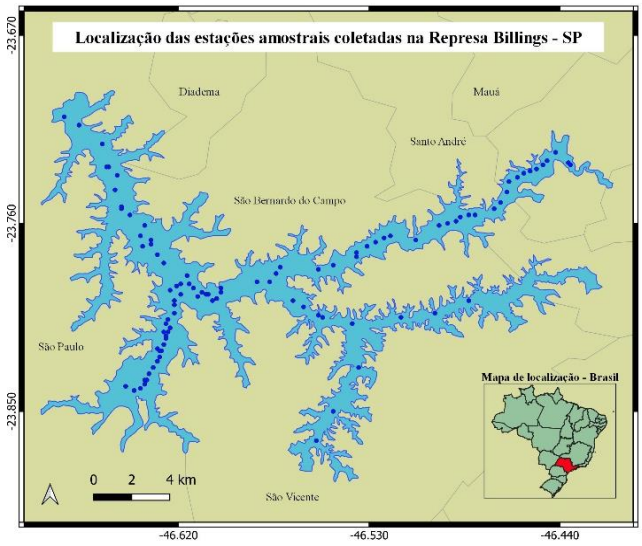


Figura 1: Mapa de localização da área de estudo.

2.2. Processamento dos dados

Os dados foram coletados em 7 campanhas de campo entre os anos de 2020 e 2021 totalizando 104 pontos amostrais distribuídos por toda a extensão da Represa Billings. As medidas radiométricas foram obtidas com o sensor RAMSES-TrIOS que possui alta resolução (3.3 nm) e amplitude (350 - 900 nm) espectral. A Reflectância de Sensoriamento Remoto foi calculada pela Equação 1:

$$R_{rs}(\theta,\varphi,\lambda) = \frac{Lw(\theta,\varphi,\lambda)}{Es(\theta,\varphi,\lambda)} \quad (1)$$

onde L_w indica a radiância emergente da coluna d'água e E_s indica a irradiância descendente. A determinação de $R_{rs}(\theta,\varphi,\lambda)$ seguiu os protocolos estabelecidos por [10].

Para a determinação do Coeficiente de Absorção a_{CDOM} foram coletadas amostras de agua para cada estação. As amostras foram filtradas em filtro de nylon Whatman® com tamanho de poro de 0.22µm e armazenadas em frasco âmbar em ambiente refrigerado. As amostras filtradas foram analisadas no espectrofotômetro Shimadzu UV/VIS 2600i, com leituras espectrais entre 220 e 800 nm, e a_{CDOM} foi calculado de acordo com a Equação 2:

$$a_{CDOM}(\lambda) = \frac{2.303 * A(\lambda)}{L} \quad (2)$$

onde $A(\lambda)$ indica o valor da absorbância espectral e L(m) o comprimento da cubeta de quartzo (10 mm) utilizada para a leitura dos espectros. As medidas de a_{CDOM} foram determinadas a partir do protocolo estabelecido por [2]. O diagrama apresentado na Figura 2 indica a sequência de etapas para realização deste trabalho.

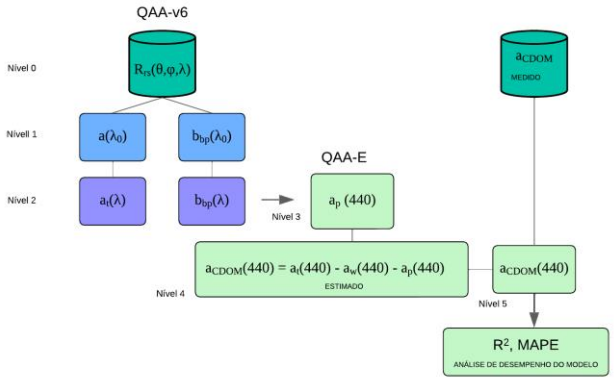


Figura 2: Diagrama de etapas para estimativa de a_{CDOM}

A partir de R_{rs} (Nível 0) foram derivados a absorção total $a_t(\lambda)$ e o retroespalhamento total espectral $b_{bp}(\lambda)$ (Nível 2) por meio do algoritmo QAA-v6. Para isto, foi utilizado 670 como comprimento de onda de referência (λ_0). Segundo (8) o λ_0 (Nível 1) deve ser definido onde: a) a dispersão elástica pode ser medida com precisão, b) $a(\lambda_0)$ pode ser estimada a partir de $r_{rs}(\lambda_0)$ e c) a absorção pela água pura é dominante. Com isto, se assume que a_t é igual a a_w em λ_0 [14], embora haja influência da absorção por outros constituintes. Os cálculos para implementação do QAA-v6 não são apresentados em

razão do espaço disponível, mas podem ser encontrados no IOCCG *Report* [7].

O algoritmo QAA-E decompõe a absorção total $a_t(440)$ em absorção pelo particulado $a_p(440)$ e absorção por $a_{CDOM}(440)$ usando a relação entre $b_{bp}(555)$ e $a_p(440)$. A etapa principal da decomposição de $a_t(440)$ é examinar a correlação entre $a_p(440)$ versus $b_{bp}(555)$ para determinar os dois coeficientes j1 e j2. A Equação 3 demonstra o cálculo de a_p (Nível 3):

$$a_p(440) = j1 * b_{bp}(555)^{j2} \quad (3)$$

onde j1 = 0.63 e j2 = 0.88. Para estes coeficientes, foram adotados os valores sugeridos por [16], que foram calibrados a partir do NASA *Bio-Optical Marine Algorithm Data Set* (NOMAD) e os dados sintéticos do *International Ocean Color Coordinating Group* (IOCCG). A partir dos dados obtidos para a_p, foi calculado o coeficiente de absorção $a_{CDOM}(440)$ (Nível 4) conforme apresentado Equação 4:

$$a_{CDOM}(440) = a_t(440) - a_w(440) - a_p(440) \quad (4)$$

onde a_t representa a absorção total que é subtraída da absorção pela água pura a_w e absorção por detritos a_d para derivar a_{CDOM}. Dados de a_{CDOM} medidos em laboratório foram utilizados para a avaliação final do desempenho do modelo pelas métricas estatísticas R^2 e MAPE.

3. RESULTADOS

Os espectros de R_{rs} apresentados na Figura 3 demonstram que houve grande variação da absorção nos comprimentos de onda do azul. Isto se deve ao pico de absorção por CDOM neste comprimento de onda, somado influencia da absorção por pigmentos de clorofila. Com isto, a dominância de pigmentos por clorofila influencia a absorção nos comprimentos de onda do azul.

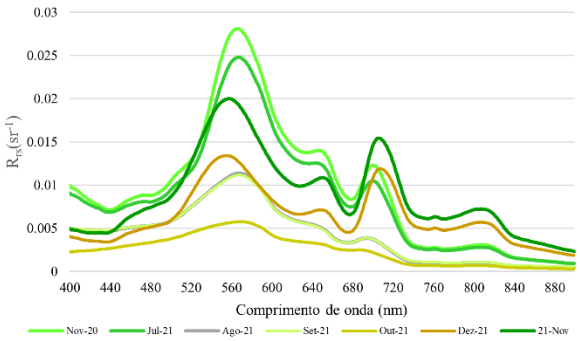


Figura 3: Espectros de R_{rs} na Represa Billings.

Os espectros de absorção total $a_t(\lambda)$ derivados pelo QAA-v6 por meio dos dados de R_{rs} coletados *in situ*, indicaram a presença de constituintes absorvedores dissolvidos e articulados na água. A Figura 4 mostra um espectro de absorção total $a_t(\lambda)$ estimada para cada campanha.

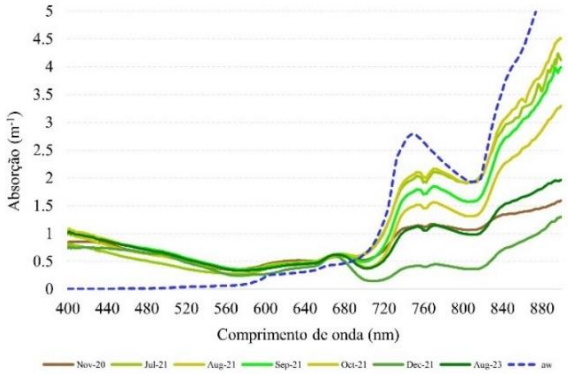


Figura 4: Espectros de at(λ) derivados pelo QAA-v6.

O QAA-v6 foi originalmente calibrado para águas costeiras, considerando que $a_t(640)$ era dominado pela $a_w(640)$. Como se observa na Figura 4, isto não ocorre para os dados da Represa Billings, onde $a_w(640)$ representa ~50% de $a_t(\lambda)$. Por isto foram encontradas significantes diferenças entre $a_{CDOM}(440)$ estimado pelo QAA-E e $a_{CDOM}(440)$ medido em laboratório. A Figura 5 demonstra a comparação entre o medido e o estimado.

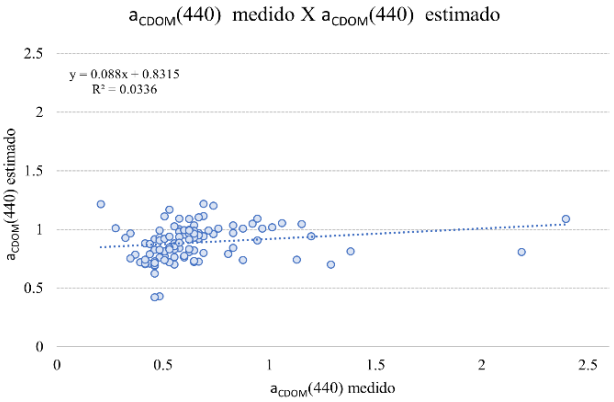


Figura 5: Comparação entre $a_{CDOM}(440)$ estimado e $a_{CDOM}(440)$ medido em laboratório.

4. DISCUSSÃO

Os modelos QAA-v6 e QAA-E foram originalmente parametrizados águas costeiras e estuários. Apesar de receberem influência de corpos d'água continentais, águas costeiras não possuem a mesma complexidade bio-óptica e propriedades biogeoquímicas que lagos, rios e represas. Isto é de grande significância para o baixo desempenho alcançado pelo modelo, pois a Represa Billings mantém condições hipereutróficas o ano todo [5]. Como consequência o QAA-v6 subestimou os valores de a_{CDOM} atingindo MAPE = 60% e

R^2 = 0.03. Com efeito, é provável que a dominância da absorção por pigmentos de clorofila na banda do azul tenha aumentado o erro na estimativa pelo modelo.

Os coeficientes j1 e j2 também impactam na estimativa de a_{CDOM}, pois os valores para estes coeficientes foram calibrados utilizando dados NOMAD e sintéticos do IOCCG a partir da correlação entre $a_p(440)$ e $b_{bp}(555)$ para estes dados. No entanto, esta correlação pode não ocorrer para esta área de estudo devido à complexidade bio-óptica e diferenças biogeoquímicas quando comparado à áreas costeiras.

A maioria das versões do QAA subestimam as IOPs quando aplicadas para águas eutróficas [14]. Para este estudo houve subestimação das estimativas como demonstrado na Figura 5. Possíveis estratégias para melhoria nas estimativas são: a) seleção de comprimentos de onda representativos dos COAs, b) calibração de valores diretamente associados aos pigmentos e detritos, além dos coeficientes de absorção de material orgânico utilizando dados da própria área de estudo [14].

5. CONCLUSÕES

Este trabalho realizou a avaliação conjunta dos algoritmos QAA-v6 e QAA-E para estimar o Coeficiente de absorção $a_{CDOM}(440)$ na Represa Billings. Foram derivados a absorção $a_t(\lambda)$ e retroespalhamento total $b_{bp}(\lambda)$ por meio do algoritmo QAA-v6 e $a_{CDOM}(440)$ por meio do QAA-E.

O QAA-v6 subestimou as estimativas de $a_t(\lambda)$ devido aos pressupostos estarem calibrados para estimar IOPs em estuários e águas costeiras. Os coeficientes j1 e j2 do QAA-E foram calibrados com bancos de dados de águas costeiras e provavelmente enviesaram as estimativas de $a_{CDOM}(440)$. Desta forma, a aplicação do algoritmo em águas complexas hipereutróficas da represa Billings explicam o baixo desempenho das estimativas.

Investigações futuras serão conduzidas para re-parametrizar o modelo QAA e suas variações com o objetivo de verificar se é possível recuperar estimativas adequadas e confiáveis de absorção por $a_{CDOM.}$

6. AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Processo FAPESP nº 2023/07443-7) pelo suporte financeiro para realização desta pesquisa.

7. REFERÊNCIAS

[1] Barbosa, C.C.F.; Novo, E.M.L.M.; Martins, V.S.. Introdução ao Sensoriamento Remoto de Sistemas Aquáticos: princípios e aplicações. 1ª edição. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais. São José dos Campos. 161p. 2019.

[2] Bricaud, A. et al. Absorption by dissolved organic matter of the sea (yellow substance) in the UV and visible domains. **Limnol. Oceanogr**, v. 26, n. 1, p. 43-53, 1981.

[3] CETESB- Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental. **Florações de cianobactérias**. 2023. Disponivel em:https://cetesb.sp.gov.br/laboratorios/atendimento-a-emergencia/floracoes-de-cianobacterias/>.

[4] Kirk J.T.O. Light and Photosynthesis in Aquatic Ecosystems, Cambridge University Press. Cambridge, 3rd edn. 649pp. 2011.

[5] Lamparelli M.C. Graus de trofia em corpos d'água do estado de São Paulo: avaliação dos métodos de monitoramento. 2004. Tese - Instituto de Biociências, University of São Paulo, São Paulo, 2004.

[6] Lee Z.P. et al. Euphotic zone depth: Its derivation and implication to ocean-color remote sensing. Journal of Geophysical Research: Oceans, v. 112, n. C3, 2007.

[7] Lee, Z. et al. Update of the quasi-analytical algorithm (QAA_v6). International Ocean Color Group Software Report [2013-04-03]. Retrieved August, v. 26, p. 2021, 2014.

[8] Lee, Z., et al. "Deriving inherent optical properties from water color: a multiband quasi-analytical algorithm for optically deep waters." Applied Optics. 2002.

[9] Matthews, M.W. A current review of empirical procedures of remote sensing in inland and near-coastal transitional waters, **International J**ournal of Remote Sensing, v. 32, n. 21, p. 6855-6899, 2011.

[10] Mobley C.D. Light and water: radiative transfer in natural waters. San Diego: Academic press. 592 p. c1994.

[11] Pope, R. M.; Fry, E. S. Absorption spectrum of pure water. II. Integrating cavity measurements. **Applied optics**, v. 36, n. 33, p. 8710-8723, 1997.

[12] Rocha, Júlio Cesar. **Substâncias húmicas aquáticas**. Unesp, 2003.

[13] Sistema Integrado de Gestão Ambiental (SIGAM). Plano de Manejo. Parque Estadual Águas da Billings, 2021.

[14] Watanabe, F. et al. Parametrization and calibration of a quasi-analytical algorithm for tropical eutrophic waters. ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, v. 121, p. 28-47, 2016.

[15] Zhu W., Yu Q., Tian Y.Q., Becker B. L., Zheng T., Carrick H. J. An Assessment of Remote Sensing Algorithms for Colored Dissolved Organic Matter in Complex Freshwater. v.140, p.766-778, 2014.

[16] Zhu, W.; YU, Q.. Inversion of chromophoric dissolved organic matter from EO-1 Hyperion imagery for turbid estuarine and coastal waters. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, v. 51, n. 6, p. 3286-3298, 2012.