

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INNOVAÇÃO
OBSERVATÓRIO NACIONAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ASTRONOMIA



TESE DE DOUTORADO

**EFEITO DE FORMA SOBRE ESPECTROS DE ASTEROIDES E
DETERMINAÇÃO DE CONSTANTES ÓTICAS**

JORGE ALEJANDRO GONZALES DÁVALOS

Rio de Janeiro, 25 de Abril de 2016

Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação
Observatório Nacional
Programa de Pós-Graduação em Astronomia

Tese de Doutorado

**Efeito de Forma sobre Espectros de Asteroides e Determinação de
Constantes Óticas**

Jorge Alejandro Gonzales Dávalos

Tese submetida ao Observatório Nacional do
Rio de Janeiro como parte dos requisitos
para a obtenção do título de DOUTOR
em Astronomia.

Orientador: Jorge M. Carvano

Rio de Janeiro, 25 de Abril de 2016

Agradecimentos

Ante que tudo quero agradecer a meu orientador Jorge M. Carvano pela oportunidade de fazer o doutorado, pela paciência e, que sem a sua ajuda este trabalho não teria sido possível.

A meus professores nesta parte do doutorado: Jorge Carvano, Rodney da Silva Gomez, Jorge Ramiro de la Reza e Katia Cunha.

Também quero agradecer a Sergio Silva pela sua ajuda de um modo tão desinteressada. Obrigadinho Sergio!. A Gabriela Coutinho, que junto a Sergio compartilamos sala nos últimos anos de doutorado. A Raisia Richter, mia professora de piano clássico, obrigadinho por esta nova experiência.

Quero também agradecer a meu amigo e professor Walter Guevara pelo apoio na primeira parte da mia formação. A meus amigos: Edith Tueros, Erik Meza, Fernando Valle, Gabriel Ferrero, Gina Roca, Mara Pelayo, Maria Isela Zevallos, Mariela Huaman, Nobar Baella, Jorge Samanes, Riano Giribaldi e Vanessa Navarrete.

Também quero agradecer a toda a familia Suárez e de um modo muito especial a Andrés Suárez Mendoza (Pochito), pela sua ensinança da astronomia por meio dos documentais Cosmos de Carl Sagan. Isto foi inspirador para mim e decidi que eu também queria falar das estrelas. Obrigadinho Pochito!. A Ismael Suárez Mendoza (o doc) pela ajuda incondicional no momento que eu mais precisava e pelas largas horas de conversa sobre ciência, política, literatura, arte, etc. A meu amigo Juan Martín Suárez (Jhonny). A meus pais.

A CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Efeito de Forma sobre Espectros de Asteroides e Determinação de Constantes Óticas

Jorge Alejandro Gonzales Dávalos

Tese submetida ao Observatório Nacional do Rio de Janeiro em 19 Abril de 2016, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Astronomia.

Neste trabalho geraram-se espectros sintéticos com efeito de forma, determinando-se seus parâmetros espectrais que são: centro das bandas de absorção, a razão das bandas e a inclinação do espectro. Mostrou-se que só a inclinação tem dependência com a forma do objeto. As constantes óticas foram determinadas por inversão de espectros de meteoritos obtidos da base de dados RELAB. Empregando-se o modelo de refletância bidirecional de Hapke. Para isso, programou-se um algoritmo genético para explorar o espaço das soluções dos parâmetros de Hapke, e assim determinar soluções mais realistas ao problema de inversão. Mostra-se que os parâmetros óticos determinados não são únicos, e as soluções aceitáveis estão dentro do 30% dos melhores valores. Também viu-se que as circunstanciais observacionais e a forma, podem estar afetando os parâmetros espectrais que são relacionados à classificação taxonômica. Portanto, estes são importantes serem tomados em conta ao momento de interpretar classificação taxonômica de asteroides.

Palavras chaves: Meteoritos, Constantes Óticas, Espectroscopia de Reflexão.

Abstract

Shape effect on the asteroid spectra and determination of optical constants

Jorge Alejandro Gonzales Dávalos

Submitted to the Observatório Nacional of Rio de Janeiro in Abril 19, 2016, in partial fulfillment of the requirements for the Doctor's degree in Astronomy.

In this work were generated synthetic spectra with shape effect, determining its spectral parameters: the center of the absorption bands, the ratio of the bands and the spectral slope. It has been shown that only the slope is dependent on the shape of the object. The optical constants were determined by inverting meteorites spectra obtained from RELAB database. Employing the bidirectional reflectance model for Hapke. For this purpose, was implemented a genetic algorithm for exploring the space of solutions of Hapke parameters and thereby determine realistic solution of the inversion problem. It is shown that the optical parameters are not unique and the solutions are within the acceptable 30% of the best values. We also seen that the observational circumstances and shape effect, may affect the spectral parameters that are related to the taxonomic classification. So these are important to taken into account at the time of interpret the taxonomic classification of asteroids.

Keywords: Meteorites, Optical Constants, Reflection Spectroscopy.

Sumário

1	Introdução	13
1	Asteroides	13
2	Meteoritos	16
2.1	Meteoritos Rochosos	16
2.2	Meteoritos de Ferro	17
2.3	Meteoritos Ferro-Rochosos	18
2	Métodos de determinação de composição de asteroides	19
1	Taxonomia de asteroides	19
2	Relações empíricas para determinar abundância de fase e composição, para espectros de asteroides dominados por minerais de olivina e piroxênio	21
3	Modelos de transferência radiativa	25
3.1	Modelo de refletância bidirecional de Hapke	25
3	Meteoritos HED e a amostra dos meteoritos estudados	48
1	Meteoritos HED	48
1.1	Meteorito Eucrito	49
1.2	Meteorito Diogenito	50
1.3	Meteorito Howardito	51
2	Amostra dos meteoritos HED	52
2.1	Amostra de meteoritos eucritos	54

2.2	Amostra de meteoritos diogenitos	57
2.3	Amostra de meteoritos howarditos	58
4	Determinação de constantes óticas	60
1	Introdução	60
2	Teste inicial	65
2.1	Inversão da equação de refletância de Hapke considerando o fator de porosidade K	66
2.2	Inversão da equação de refletância considerando o fator de porosidade K e o efeito de rugosidade macroscópica $\bar{\theta}$	77
2.3	Determinação dos valores otimizados de D , K e $\bar{\theta}$ para uma sub-amostra de meteoritos HED	78
2.4	Discussões	98
3	Implementação final - Procurando soluções consistentes	99
3.1	Artigo: Numerical determination of visible/NIR optical constants from laboratory spectra of meteorites	109
5	Efeitos de forma sobre parâmetros empíricos	149
1	Variação dos parâmetros espectrais em função da geometria do elipsoide	150
2	Variação da inclinação em função do ângulo de fase para uma geometria elipsoidal.	156
6	Efeitos fase e forma sobre a classificação taxonômica	164
1	Artigo: Shape and solar angle effects on the taxonomic classification of asteroids	165
7	Conclusões e perspectivas futuras	176

Lista de Figuras

1.1	Neste gráfico as linhas de cor azul são as órbitas dos planetas desde Mercúrio até Júpiter. O grande número de objetos em cor verde são asteroides do Cinturão Principal. Os círculos de cor vermelho são objetos que tem periélio menor a 1.3 UA. Os objetos de cor azul são os asteroides Troyanos. Cometas são mostrados em quadrado azul. Figura extraída do Minor Planet Center (2015).	14
1.2	Esta figura mostra a distribuição dos asteroides do cinturão principal como também os cruzadores da órbita de Marte e NEAs (Near Earth Objects) com respeito a sua excentricidade. Figura extraída de de Elía and Brunini (2007).	15
2.1	Espectros médios na classificação de Tholen contra o comprimento de onda, na faixa $0.3 - 1.1 \mu\text{m}$. Figura extraída de Tholen and Barucci (1989).	20
2.2	Espectro de uma mistura de olivina-ortopiroxênio 65/35, preparada com tamanho de grão entre $38 - 53 \mu\text{m}$. As principais características espectrais são o centro da banda I e as áreas para cada banda. Figura extraída de Cloutis et al. (1986).	23
2.3	Esta figura mostra a relação linear entre a abundancia de fase com respeito ao ortopiroxênio em função do parâmetro BAR, para diferentes distribuições em tamanho de grão. Figura extraída de Cloutis et al. (1986).	23
2.4	Esta figura mostra a posição da banda I versus a abundancia de fase do ortopiroxênio. Figura extraída de Cloutis et al. (1986).	24
2.5	Função de fase obtida a partir da teoria de Mie, para partículas esféricas com parâmetro de tamanho $X = 100$, para constantes óticas $m = 1.50 + i0$ e $m = 1.50 + i0.25$. Pode-se observar a contribuição do fenômeno de difração, o pico perto de 180° . Figura extraída de Hapke (1993).	30

2.6	Função de fase obtida a partir da ótica geométrica para uma esfera transparente com constante ótica $m = 1.50 + i0$ e parâmetro de tamanho de $X = 100$. Onde os fenômenos à contribuição da função de fase são os fenômenos de reflexão e refração. Figura extraída de Hapke (1993).	31
2.7	Equivalente <i>slab</i> para uma partícula de tamanho maior que o comprimento de onda, figura extraída de Hapke (1993).	32
2.8	A figura mostra a eficiência de espalhamento contra αD , obtidas por meio da ótica geométrica e o equivalente <i>slab</i> , para uma constante ótica de $m = 1.50 + i0$, figura extraída de Hapke (1993).	35
2.9	Aqui se têm dois funções de fase, a linha de cor azul apresenta a função de fase para partículas transparentes com valores de $b = 0.6$ e $c = -0.9$. A linha de cor verde será o perfil da função de fase para partículas opacas com $b = 0.2$ e $c = 1.0$	37
2.10	Figura (a) mostra os dados de b e c obtidos diretamente e indiretamente de 495 espectros. A Figura (b) mostra o ajuste a centroide das medidas, figura extraída de Hapke (2012a).	38
2.11	(a) é a transmitância versus o número de camadas de partículas, para um meio contínuo e discreto. (b) é o fator de preenchimento versus D/λ , mostrando as regiões onde o efeito de coerência é importante e onde o meio será opaco. Figura extraída de Hapke (2008).	40
2.12	Esta figura mostra 18 metros de perfil de rugosidade medidos de um cratera vulcânica no estado de Nevada-EU. Figura extraída de Shepard et al. (2001).	42
2.13	Reprodução parcial das figuras de Hapke (1993) que mostram o efeito da rugosidade macroscópica sobre o perfil de brilho de um planeta esférico com baixo albedo $w = 0.25$. As Figuras (a) e (b) mostram a variação da refletância em função da longitude e latitude para dois valores de $\bar{\theta}$ respectivamente.	46
3.1	Esquema da estrutura interna de (4) Vesta. O núcleo está aproximadamente em escala, porém não a crosta. Figura extraída de Zuber et al. (2011)	49

3.2	A Figura (a) á o meteorito eucrito basáltico QUE 97053, (b) o meteorito eucrito metamorfoseado EET 90020, (c) o meteorito eucrito acumulado Moore County, (d) o meteorito diogenito de olivina GRA 98108, (e) o meteorito diogenito brecheado QUE 99050 e, (f) o meteorito howardito PCA 02019. Figura extraída de Zuber et al. (2011).	52
4.1	A figura (a) são as contantes óticas obtidas por inversão considerando o diâmetro médio, a figura (b) são as constantes óticas obtidas com o diâmetro otimizado. Figura extraída de Lucey (1998).	62
4.2	(a) contantes óticas obtidas por inversão para vários minerais, e (b) ajuste ao espectro observado utilizando uma constante ótica específica. Figura extraída de Li and Li (2011).	63
4.3	Constantes óticas empregando os modelos de Hapke e Shkuratov para partículas esféricas e irregulares. A curva de cor preto é a constante ótica da amostra Bamble obtida por absorvância. Figura extraída de Li and Milliken (2015). . . .	64
4.4	Espectros gerados a partir das constantes óticas determinadas empregando o modelo de Hapke para amostras de meteorito eucrito. A linha cheia é o espectro observado e a linha tracejada é o espectro modelado. Figura extraída de Li and Milliken (2015).	64
4.5	(a) Constantes óticas $n_i(\lambda)$ para três valor de tamanho de grão, 10 μm , 15 μm e 20 μm , mantendo constante o fator de preenchimento a $\phi = 0.3$ e a parte real da constante ótica a $n_r = 1.5$, (b) constantes óticas para três valores de fator de preenchimento $\phi = [0.1, 0.3, 0.5]$, mantendo constante o tamanho de grão em 10 μm , (c) constantes óticas para três valores do índice de refração real $n_r = [1.2, 1.5, 1.8]$	70

4.6	(a) Espectros refletância para o meteorito eucrito ALHA76005,85. O espectro A corresponde ao intervalo de grão de $0 - 25 \mu\text{m}$; o espectro B: $25 - 45 \mu\text{m}$; o espectro C: $45 - 75 \mu\text{m}$; o espectro D: $75 - 125 \mu\text{m}$; espectro D: $125 - 250 \mu\text{m}$ e, o espectro F: $250 - 500 \mu\text{m}$. Todos obtidos sob a mesma geometria de visada, $i=30^\circ$, $e=0^\circ$ e, $g=30^\circ$, (b) constantes óticas $n_i(\lambda)$ obtido por inversão da equação de Hapke considerando diâmetro médio para cada intervalo de tamanho de grão, 12.5, 35.0, 60.0, 100.0, 187.5, 375.0 μm , com um valor médio para o fator de preenchimento de 0.4, com índice de refração real fixo $n_r = 1.5$, onde os ângulos de incidência, emissão e fase são 30° , 0° e 30° respectivamente.	72
4.7	A linha tracejada representam os dados do espectros de refletância e a linha cheia é o espectro de refletância ajustado em diâmetro D e fator de porosidade K , com índice de refração real $n_r = 1.5$ e, ângulos de incidência, emissão e fase de 30° , 0° , 30° respectivamente.	75
4.8	Cada figura é o espectro de refletância dividido entre o melhor ajuste em D e K , com índice de refração real $n_r = 1.5$ e ângulos de incidência, emissão e fase de 30° , 0° , 30° respectivamente. O desvio médio para cada resíduo com respeito à unidade em percentagem são: (a) 4.27, (b) 2.84, (c) 1.80, (d) 4.27, (e) 9.83 e (f) 11.82.	76
4.9	Inversão da equação 4.12 para três valores de $\bar{\theta}$, 10° , 20° e 30° graus.	77
4.10	A linha tracejada representa o espectro observado e, a linha cheia é o espectro ajustado em diâmetro D , fator de porosidade K e rugosidade macroscópica $\bar{\theta}$, com índice de refração real $n_r = 1.5$ e ângulos de incidência, emissão e fase de 30° , 0° , 30° respectivamente.	79
4.11	Cada figura é o espectro de refletância dividido entre o melhor ajuste em D , K e $\bar{\theta}$, com índice de refração real $n_r = 1.5$ e, ângulos de incidência, emissão e fase de 30° , 0° , 30° respectivamente. O desvio médio para cada resíduo com respeito à unidade em percentagem são: (a) 3.84, (b) 2.46, (c) 1.54, (d) 4.26, (e) 9.33 e (f) 12.39.	80
4.12	(a) mostra os 5 espectros refletância para a amostra Juvinas. (b) são as respectivas constantes óticas n_i que foram obtidas por inversão empregando os valores médios de diâmetro, fator de preenchimento e o ângulo de inclinação média. A linha de cor preto é a constante ótica média.	82

4.13	Espectros gerados a partir, de seu correspondente constante ótica imaginaria média n_i com valores otimizados de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média. O espectro ajustado para cada figura se amostra em linha preta cheia.	83
4.14	Aqui se mostra o quociente entre o espectro da amostra e o espectro ajustado, em outras palavras, aqui se mostra o resíduo do ajuste. O desvio médio para cada resíduo com respeito à unidade em percentagem são: (a) 2.74, (b) 1.29, (c) 1.26, (d) 3.45 e (e) 6.40.	84
4.15	(a) mostra os 4 espectros refletância para a amostra Millbillillie. (b) são as respectivas constantes óticas n_i que foram obtidas por inversão empregando os valores médios de diâmetro, fator de preenchimento e o ângulo de inclinação média. A linha de cor preto é a constante ótica imaginária média n_i	86
4.16	Espectros gerados a partir, de seu correspondente constante ótica imaginaria média n_i com valores otimizados de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média. O espectro ajustado para cada figura se amostra em linha preta cheia.	87
4.17	Aqui se mostra o quociente entre o espectro da amostra e o espectro ajustado, em outras palavras, aqui se mostra o resíduo do ajuste. O desvio médio para cada resíduo com respeito à unidade em percentagem são: (a) 3.22, (b) 0.72, (c) 2.16 e (d) 6.25.	88
4.18	(a) mostra os 6 espectros de refletância para esta amostra de meteorito diogenito. (b) são as constantes óticas imaginarias obtidas por inversão de equação de Hapke 4.12, considerando valores médio de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média de, para a amostra A: 12.5 μm , amostra B: 35 μm , amostra C: 60 μm , amostra D: 100 μm , amostra E: 187.5 μm , amostra F: 375 μm e os valores de K , $\bar{\theta}$ para todos são 1.6274 e 22.5° respectivamente. A linha de cor preto é a constante ótica imaginária média n_i	91
4.19	Espectros ajustados com valores otimizados de D , K e $\bar{\theta}$. A linha de cor vermelho é para o primeiro método de ajuste e linha de cor azul é para o segundo método de ajuste. A linha tracejada é o espectro da amostra.	92

4.20	Estes são os resíduos que são obtidos ao dividir o espectro de cada amostra entre o espectro ajustado com valores otimizados de D , K e $\bar{\theta}$. Para o primeiro método são: 3.99, 1.48, 1.32, 4.01, 8.87, 11.55; e para o segundo método são: 4.04, 2.69, 4.23, 4.48, 9.20 e 11.55.	93
4.21	(a) são os espectros de refletância para as 6 amostras, (b) suas respectivas constantes óticas, onde a linha de cor preto é a constante ótica imaginaria média n_i	95
4.22	Aqui se mostram os espectros ajustados em linha cheia, a linha tracejada é o espectro da amostra.	96
4.23	Estas figuras mostram os resíduos dos ajustes, que é o espectro da amostra dividido entre o espectro ajustado. Os resíduos médios em porcentagens para a (a) até a (f) são: 5.49, 2.90, 4.44, 6.32, 10.12 e 12.37.	97
4.24	Fator de porosidade K contra o diâmetro determinado para as cinco amostras de meteoritos.	99
4.25	Constante ótica k em função do comprimento de onda, para cinco valores de s que são dependentes do comprimento de onda.	102
4.26	Constante ótica k em função do comprimento de onda, para cinco valores de s que não são dependentes do comprimento de onda.	102
5.1	Elipsoide com eixos de $a_1 = 1, a_2 = a_3 = 0.5$, com ângulo de aspecto de 30° , obliquidade de 30° e fase de rotação de 60°	150
5.2	Aqui a variação é com respeito ao eixo a_2 . (a) é para um esfera, (b) é para $a_1 = 1.0, a_2 = 0.7, a_3 = 1.0$ e (c) para $a_1 = 1.0, a_2 = 0.4, a_3 = 1.0$	151
5.3	Aqui a variação da forma é para o eixo a_3 . (a) é para uma esfera, (b) é para $a_1 = 1.0, a_2 = 1.0, a_3 = 0.7$ e, (c) é com $a_1 = 1.0, a_2 = 1.0, a_3 = 0.4$	151
5.4	Espectros de refletância gerados para diferentes geometrias. O espectro de linha preta é para uma geometria plano-paralelo e os demais são para uma geometria elipsoidal. Os elipsoides têm como fase rotacional 30° e ângulo de fase de 30°	152
5.5	Espectros de refletância gerados para distintas geometrias com fase rotacional de 30° e ângulo de fase de 30°	153

5.6	Variação da inclinação em função da forma do elipsoide. A variação da forma do elipsoide é primeiro na direção de eixo de rotação, e a segunda variação é através do equador.	156
5.7	Variação da inclinação espectral em função do ângulo de fase para o meteorito Allan Hills A76005, para uma geometria plano-paralela, esférica e dois elipsoides com variações dos eixos a_3 e a_2 , por separado.	159
5.8	Variação da inclinação espectral em função do ângulo de fase para o meteorito Juvinas, para uma geometria plano-paralela, esférica e dois elipsoides com variações dos eixos a_3 e a_2 por separado.	159
5.9	Variação da inclinação espectral em função do ângulo de fase para o meteorito Millbillillie, para uma geometria plano-paralela, esférica e dois elipsoides com variações dos eixos a_3 e a_2 por separado.	160
5.10	Variação da inclinação espectral em função do ângulo de fase para o meteorito Elephant Moraine A79002, para uma geometria plano-paralela, esférica e dois elipsoides com variações dos eixos a_3 e a_2 por separado.	160
5.11	Espectros de refletância para o meteorito Juvinas gerados para uma geometria plano-paralelo e elipsoidal para diferentes ângulos de fase.	163

Lista de Tabelas

3.1	Amostra selecionada de meteoritos eucritos	54
3.2	Amostra selecionada de meteoritos diogenitos	57
3.3	Amostra selecionada de meteoritos howarditos	58
4.1	Diâmetro D e fator de preenchimento ϕ otimizados. As primeiras três colunas são os valores iniciais de entrada para a minimização (D, ϕ, K) e, as seguintes duas colunas são os valores obtidos.	74
4.2	Diâmetro D , fator de preenchimento ϕ e ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$ otimizados. As primeiras três colunas são os valores iniciais de entrada para a minimização e as seguintes três colunas são os valores obtidos.	89
4.3	Diâmetro D , fator de preenchimento ϕ e ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$ otimizados. As primeiras três colunas são os valores iniciais de entrada para a minimização e as seguintes três colunas são os valores obtidos.	94
4.4	Diâmetro D , fator de preenchimento ϕ e ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$ otimizados. As primeiras três colunas são os valores iniciais de entrada para a minimização e as seguintes três colunas são os valores obtidos.	98
4.5	Comparação entre os valores de D e K para o meteorito eucrito Allan Hills A76005.	108
4.6	Comparação entre os valores de D e K para o meteorito diogenito Elephant Moraine EETA79002.	108
5.1	Comparação dos parâmetros espectrais entre os elipsoides em função do eixo a_2 .	153
5.2	Comparação dos parâmetros espectrais entre os elipsoides em função do eixo a_3 .	154

5.3	Mostra-se a variação dos parâmetros espectrais para os meteoritos: Juvinas, Millibillillie e Elephant Moraine A79002. A primeira fila de cada grupo de asteroides são os parâmetros para a geometria plano-paralelo. As seguintes filas são para as geometrias elipsoidais.	155
5.4	Variação da inclinação por grau entre os intervalos em ângulo de fase de $10^\circ - 20^\circ$, $20^\circ - 40^\circ$ e $40^\circ - 60^\circ$, para uma geometria plano-paralelo, uma geometria esférica e dois elipsoide com eixos de a_3 de 0.7 e 0.4, para os meteoritos Allan Hills A76005, Juvinas, Millibillillie e Elephant Moraine A79002.	161
5.5	Esta tabela mostra a inclinação para ângulos de fase de 10° , 20° , 40° e 60° . Cada grupo de dados corresponde aos meteoritos Allan Hills A76005, Juvinas, Millibillillie e o meteorito Elephant Moraine A79002, para a geometria plano-paralela, uma geometria esférica, dois elipsoide com eixos de a_3 de 0.7 e 0.4 e outros dois com eixos a_2 de 0.7 e 0.4.	162

Capítulo 1

Introdução

1 Asteroides

A palavra asteroide deriva do grego "aster", que significa estrela, e "oide"semelhança. Alguns chamam estes objetos de planetoides, que significa semelhante a um planeta. (1) Ceres foi o primeiro asteroide descoberto (agora denominado como planeta anão), pelo monge italiano Giuseppe Piazzi, em primeiro de janeiro de 1801 ([Foderá et al., 2002](#)). Os asteroides do cinturão principal e do cinturão de Kuiper são os restos dos planetesimais formados nos primeiros primórdios do sistema solar. Estes objetos são irregulares em forma e seu tamanho varia entre alguns metros e várias centenas de quilômetros. A grande maioria está entre as órbitas de Marte e Júpiter (ver Figura 1.1), no chamado Cinturão Principal de Asteroides (MBA, siglas em inglês).

Segundo o *Minor Planet Center* se têm um total de 713 588 planetas menores conhecidos, entre asteroides numerados e não numerados e cometas, os numerados são objetos que tem sua orbita bem determinada. Os asteroides estão espalhados desde a região dos planetas terrestres, até a órbita de Júpiter. Esse grande número de objetos permite que o estudo coletivo de suas propriedades físicas forneça limites para os modelos de formação e evolução nessa região do Sistema Solar.

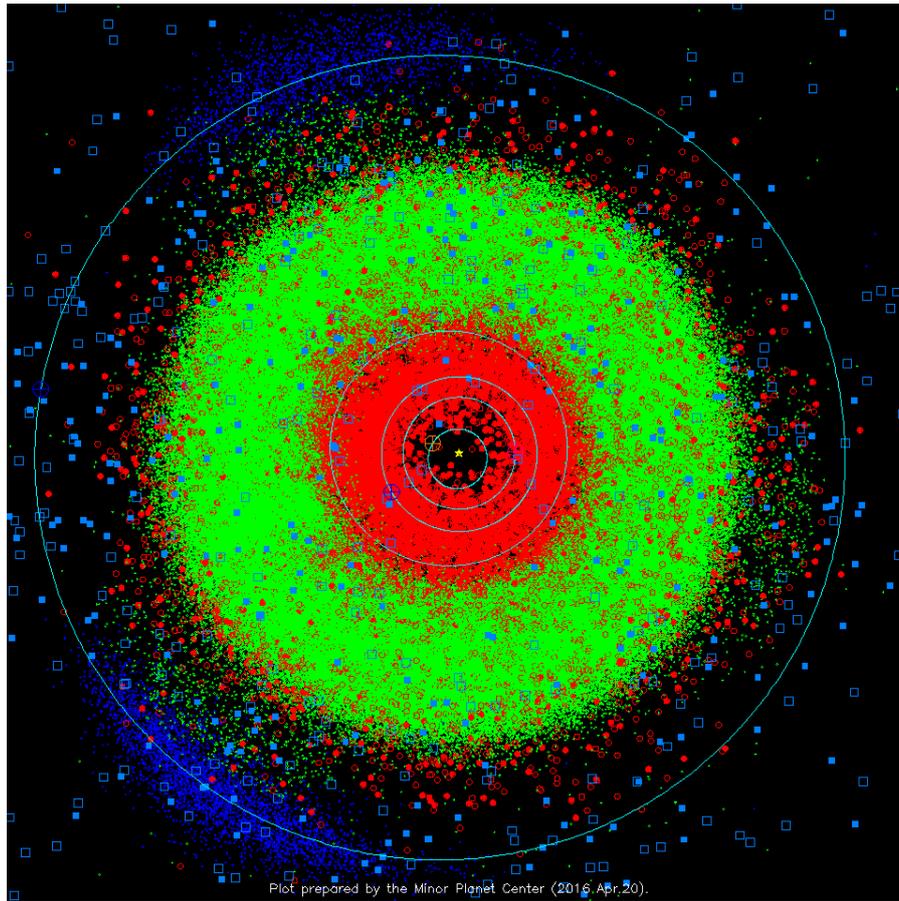


Figura 1.1: Neste gráfico as linhas de cor azul são as órbitas dos planetas desde Mercúrio até Júpiter. O grande número de objetos em cor verde são asteroides do Cinturão Principal. Os círculos de cor vermelho são objetos que tem periélio menor a 1.3 UA. Os objetos de cor azul são os asteroides Troianos. Cometas são mostrados em quadrado azul. Figura extraída do Minor Planet Center (2015).

A seguinte Figura 1.2 mostra um diagrama de distribuição, tanto de asteroides numerados como não numerados. O eixo x corresponde a semi-eixo maior a e o eixo y corresponde a sua excentricidade e . Os asteroides pertencentes ao Cinturão Principal são plotados com pontos pretos pequenos, os cruzadores da órbita de Marte com pontos pretos de maior tamanho. As linhas cheias são os limites para os NEAs (Near Earth Asteroids) apresentados pelos quadrados, triângulos e círculos. O cinturão principal de asteroides se estende aproximadamente entre 2 a 3.4 unidades astronômicas a partir do Sol. Este cinturão principal de asteroides se divide dinamicamente em três grandes regiões limitados por ressonâncias de movimento médio com Júpiter. O cinturão interno esta limitado em semi-eixo maior $2.1 < a < 2.5$, o cinturão intermediário está entre $2.5 < a < 2.8$ e o cinturão externo entre $2.8 < a < 3.4$.

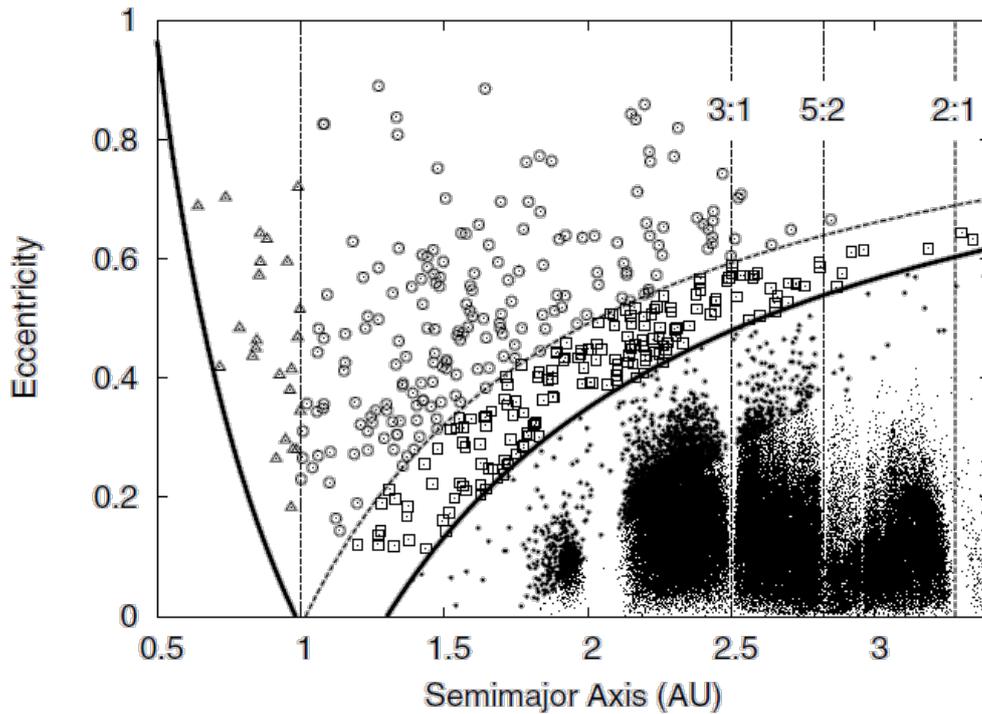


Figura 1.2: Esta figura mostra a distribuição dos asteroides do cinturão principal como também os cruzadores da órbita de Marte e NEAs (Near Earth Objects) com respeito a sua excentricidade. Figura extraída de [de Elía and Brunini \(2007\)](#).

Os NEOs são uma população de asteroides e núcleos de cometas dormentes e/ou extintos, que se localizam na região próxima da Terra. Essa população costuma ser subdividida em quatro sub-populações: Atens, Apollo, Amor e Atira. Estas sub-populações estão dinamicamente separadas como segue: Os Atens tem um semi-eixo menor a 1.0 UA (UA de unidades astronômicas) e distancia afélica maior a 0.983 UA, Apollo tem semi-eixo maior a 1.0 UA e distancia periélica menor a 1.017 UA, Amor tem um semi-eixo maior a 1.0 UA e distancia periélica maior a 1.017 UA e menor a 1.3 UA, o grupo Atira tem distancia afélica menor a 0.983 UA. Estes asteroides estão localizados em uma região dinamicamente instável ([Ribeiro et al., 2016](#)). Estes asteroides por serem cruzadores das órbitas dos planetas interiores, têm órbitas instáveis não sendo possível calcular suas constantes de movimento, ou seus elementos próprios. Sua classificação dinâmica, portanto, é baseada em seus elementos orbitais instantâneos ou osculadores. Isto implica que os objetos podem, em longos intervalos de tempo, mudar sua classificação entre as diversas sub-populações. É importante notar de que esses corpos têm uma vida dinâmica média menor do que 10^9 anos, idade do nosso Sistema Solar ([Farinella et al., 1994](#); [Gladman et al., 2000](#)). Isso implica que são removidos do Sistema Solar ou impactam nos planetas terrestres e no Sol, nesta escala de tempo.

2 Meteoritos

Os meteoritos são fragmentos originados da colisão de asteroides, principalmente asteroides do cinturão principal, e transportados à parte interna do Sistema Solar por mecanismos dinâmicos. Muitos dos meteoritos achados na superfície da Terra são os fragmentos que restaram ao colidir com a atmosfera. Estes fragmentos de asteroides são importantes porque contêm informação das primeiras etapas da formação do Sistema Solar como: composição inicial da nebulosa protoplanetária e as escalas de tempo das etapas de formação do disco protoplanetário. Em geral se têm três classes de meteoritos: meteoritos rochosos, meteoritos de ferro e meteoritos ferrosos rochosos.

Até a data de hoje, o mais documentado ingresso na atmosfera de um fragmento de asteroide é do meteoro de Chelyabinsk. Esse fragmento ingressou à atmosfera em 15 de Fevereiro de 2013 fragmentando-se a uma altura aproximada de 40 quilômetros e liberando uma energia de 500 quilo tons. Centos de fragmentos de meteoritos foram coletados alcançando uma massa maior a 100 quilogramas, estes meteoritos foram classificados como meteorito condrito ordinário LL5 ([Popova et al., 2013](#)).

A seguir vêm uma breve descrição dos principais grupos de meteoritos, para uma detalhada descrição remito à tese doutoral de [Jasmim \(2013\)](#).

2.1 Meteoritos Rochosos

Estes meteoritos são os mais comuns a cair na Terra e estão constituídos principalmente de silicatos com uma pequena quantidade de metal em sua composição. Esses meteoritos podem ser divididos em meteoritos condritos e acondritos.

Meteoritos Condritos

Os meteoritos condritos são meteoritos que passaram por pouco ou nenhum processo de aquecimento, por isso, se diz que estes meteoritos são os materiais 'prístinos' pertencentes das primeiras etapas da formação do Sistema Solar. Os materiais que conformam o meteorito foram formados sob diferentes condições térmicas dentro da nebulosa solar.

Estes meteoritos possuem inclusões esféricas de silicato de 0.1-3 mm de diâmetro denominados de cóndrulos, associadas com grãos de metais e inclusões abundantes em Al e Ca (CAIs).

As CAIs foram formadas a elevadas temperaturas entre 1200 K e 2000 K na nebulosa solar (Ireland and Fegley, 2000) e tem uma idade de formação aproximadamente de 4.567-4.568 bilhão de anos (Bouvier et al., 2007) e os côndrulos foram formados 4 milhões de anos depois da formação do Sistema Solar (Villeneuve et al., 2009).

Estes meteoritos podem ser ainda divididos em três grupos: os carbonáceos, os ordinários e meteoritos condritos enstatitas.

Meteoritos Acondritos

Os meteoritos acondritos são meteoritos provenientes dos asteroides que sofreram alterações por aquecimento e diferenciação interna, apresentam como principal característica a ausência de côndrulos. Estes meteoritos podem subdividir-se em acondritos primitivos e acondritos diferenciados, os primitivos são meteoritos que se assemelham mineralogicamente e quimicamente a os meteoritos condritos mas não possuem côndrulos, aparentemente tendo sofrido um mínimo de aquecimento. Por outro lado, os acondritos diferenciados passaram por uma grande etapa de aquecimento, derretimento parcial ou completo e fracionamento por densidade. Mineralogicamente os meteoritos acondritos podem ser compostos quase por um único mineral de olivina ou piroxênio. Entre os grupos que conformam os meteoritos acondritos, estão os meteoritos HED (Howarditos-Eucritos-Diogenitos), que serão descritos com mais detalhes no capítulo 3.

2.2 Meteoritos de Ferro

Meteoritos de ferro são importantes porque mostram evidência de processos térmicos realizados em seu corpo parental pouco tempo depois da etapa de acreção (Wadhwa and Russell, 2000). Estes meteoritos são muito pesados, ademais é raro que se fragmentem a entrar na atmosfera, por isso, estes meteoritos são os de maior tamanho. A massa total com respeito a todos os meteoritos é de 89.3%, tendo uma incidência de queda de 5.7% (Grady, 2000).

Décadas atrás, os meteoritos de ferro se classificavam de acordo a sua estrutura macroscópica, mas depois, empregando técnicas modernas de espectroscopia de raios X detectaram-se vestígios de elementos de Germânio, Gálio e Irídio. Então, baseado na concentração de esses elementos com respeito ao conteúdo de Níquel, os meteoritos de ferro se subdividem em 12 grupos químicos, onde se pensa que cada grupo representa um corpo progenitor específico.

2.3 Meteoritos Ferro-Rochosos

É o menos abundante dos três principais grupos de meteoritos, possuem uma incidência de queda na Terra de aproximadamente 1% [Grady \(2000\)](#). Estão compostos quase pela mesma quantidade de silicatos e metal. Os meteoritos de ferro-rochosos se pensam que foram formados no núcleo ou na fronteira do manto de seus corpos progenitores. Esses meteoritos se dividem em dois grupos: os pallasitos e mesossideritos.

Através do estudo dos meteoritos podemos também identificar os minerais mais comuns em asteroides, que são os minerais de olivina e piroxênio.

No que segue, o Capítulo [2](#) apresenta os principais métodos empregados na literatura para a determinação das propriedades físicas, composição e propriedades superficiais em asteroides. Primeiro se menciona a taxonomia de asteroides. A taxonomia em asteroides foi a primeira ferramenta para classificar espectros de asteroides e assim compreender suas propriedades físicas superficiais. Segundo, as relações de calibrações para a determinação de abundância e composição para espectros de asteroides dominados por minerais de olivina e piroxênio. Terceiro, o modelo de refletância bidirecional de [Hapke \(1993\)](#). Este modelo de transferência radiativa é um dos mais empregados na literatura. O modelo leva em conta vários efeitos, como as propriedades mecânicas do solo e efeitos observacionais mas, não considera a forma do objeto. Então, nos consideramos o efeito de forma no espectro de refletância para visar diferencia. No Capítulo [3](#) é feita uma descrição dos meteoritos HED (Howardita, Eucrito e Diogenito) e a amostra de meteoritos empregado para o estudo. No Capítulo [4](#) é apresentado um método original para a determinação de constantes óticas de meteoritos e minerais, quantidades necessárias para estender o estudo de efeitos de forma a uma quantidade maior de composições. No Capítulo [5](#), são mostrados resultados preliminares sobre a influência dos efeitos de forma na determinação de composição mineral a partir de parâmetros espectrais. A proposta aqui é visar diferenças ao determinar os parâmetros espectrais de espectros com efeito e sem efeito de forma. O Capítulo [6](#) é uma aplicação do Capítulo [5](#) que analisa a influência do efeito de forma e fase sobre a classificação taxonômica. E por último, o Capítulo [7](#) apresenta as conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 2

Métodos de determinação de composição de asteroides

1 Taxonomia de asteroides

A primeira ferramenta utilizada para o estudo das propriedades físicas superficiais de asteroides foi a taxonomia. A taxonomia em asteroides consiste na separação dos espectros dos asteroides em grupos definidos a partir de um conjunto de dados observacionais, como: inclinação do espectro, cor, albedo, etc. Na literatura apresentam vários tipos de taxonomias, onde cada uma considera um maior número de objetos que a anterior. As taxonomias mais empregadas até hoje são as de [Tholen \(1984\)](#) e [Bus \(1999\)](#).

A primeira classificação foi feita por [Chapman et al. \(1975\)](#), a partir do albedo e das propriedades espectrofotométricas, os autores identificaram duas grandes classes. A classe C de carbonáceos que são asteroides com baixo albedo, a classe S que são asteroides avermelhados com albedos maiores. A S é de silicatos, nesta classe ficam os asteroides com banda de minerais olivina-piroxênio. Na taxonomia de [Tholen](#), foram definidas, a partir de um subconjunto de 405 asteroides de boa qualidade dentro do ECAS (Eight-Color Asteroid Survey). [Tholen](#) define 5 principais classes: A, C, D, S e T, além de 3 classes compostas por um objeto cada: V de (4) Vesta, R de (349) Dembowska, e Q de (1862) Apollo. A classe C foi subdividida em B, G e F. Os asteroides tipo B, na definição de [Tholen](#) tem uma moderada banda de absorção na região do ultravioleta e uma inclinação média a partir de $0.4 \mu\text{m}$, que vai desde ligeiramente azul a neutro em cor. Os asteroides tipo C tem característica espectral similar aos asteroides tipo B na região espectral UV, mas sua inclinação é mais avermelhada em cor. A Figura [2.1](#) mostra

os espectros médios contra o comprimento de onda da classificação de [Tholen](#). Estes espectros estão deslocados em refletância para uma melhor observação.

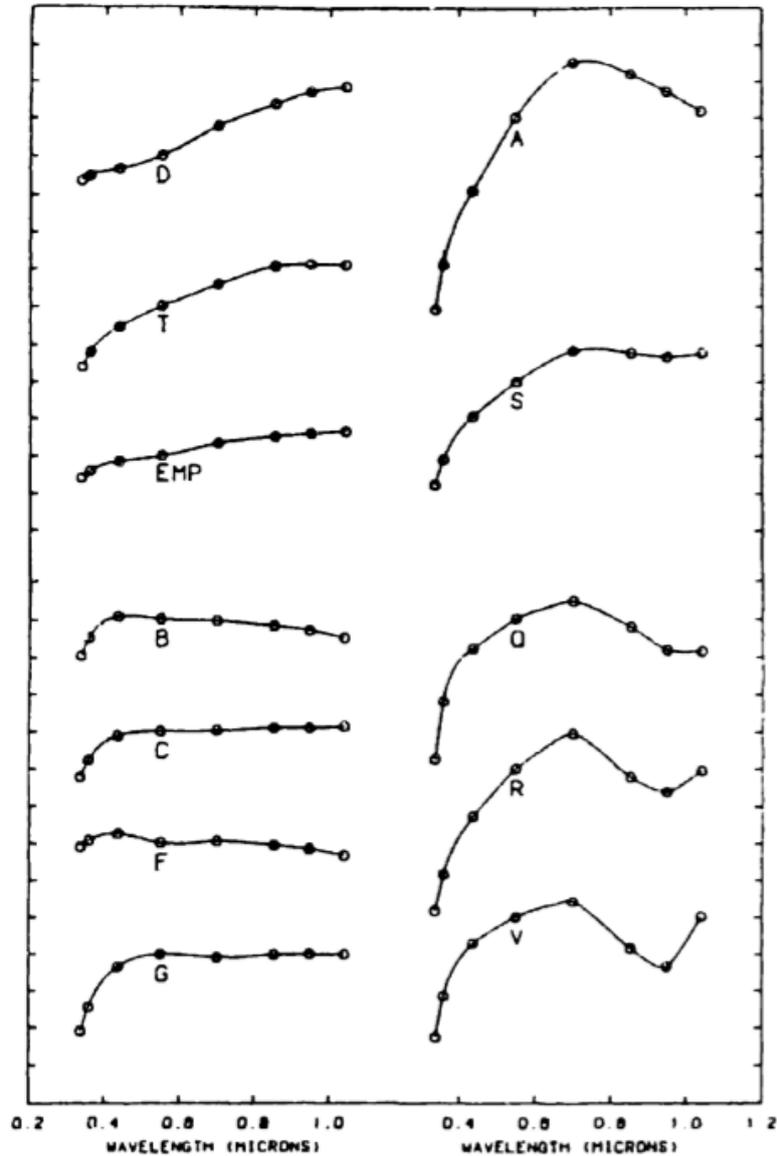


Figura 2.1: Espectros médios na classificação de [Tholen](#) contra o comprimento de onda, na faixa 0.3 – 1.1 μm . Figura extraída de [Tholen and Barucci \(1989\)](#).

Na taxonomia de [Bus](#), os asteroides tipo C podem ser divididos em três grupos, de acordo com a presença ou ausência de uma banda de absorção perto de 0.7 μm . Segundo [Vilas and Gaffey \(1989\)](#), uma similar característica espectral é achada em meteoritos condritos carbonáceos CM, sugerindo que a banda de absorção em asteroides tipo C é devido à presença de *oxidized iron* em filossilicatos, possivelmente formados por processo de alteração aquosa. Estes tipos de asteroides são designados pelas letras Ch. Neste sentido as principais classes taxonômicas são: as classes S e C, onde asteroides tipo S apresentam fortes bandas de absorção, devido à presença de minerais olivina e piroxênio e, asteroides tipo C que não apresentam fortes características

espectrais. O complexo de asteroides tipo X, na taxonomia de [Bus](#) são divididos em três grupos, o tipo X são para asteroides com espectro quase plano, exceto pela presença ocasional de duas fracas bandas de absorção em 0.5 e 0.9 μm , aproximadamente. Os outros dos tipos são Xc e Xk, que mostram diferente característica espectral em 0.7 μm aproximadamente que a classe X, além disso asteroides tipo Xk são mais avermelhados que o tipo Xc.

2 Relações empíricas para determinar abundância de fase e composição, para espectros de asteroides dominados por minerais de olivina e piroxênio

Um grupo considerável de espectros de reflexão de asteroides obtidos no intervalo visível ao infravermelho próximo ~ 0.35 a 3 μm mostra duas principais características espectrais, uma banda de absorção aproximadamente em 1 μm e outra segunda banda aproximadamente em 2 μm . Comparando estes com espectros de meteoritos obtidos em laboratório, percebe-se que estas bandas de absorção são devidas principalmente a transições de campo cristalino e por mecanismos de transferência de carga [Burns \(1993\)](#) de íons de Ferro-Magnésio em minerais máficos como olivina e piroxênio. Estes dois minerais vêm a serem as fases mais abundantes em muitos tipos de meteoritos e, os principais minerais presentes na superfície de muitos asteroides.

As características espectrais para estes minerais são relações diretas da concentração de íons de ferro; por exemplo, as posições das bandas de absorção para olivina e ortopiroxênio (piroxênio com baixo conteúdo de cálcio) se deslocam para comprimentos de onda maiores quando se incrementa o conteúdo de íons de ferro ([Burns, 1970a](#); [Adams, 1974](#)). Portanto, é possível que a partir de suas características espectrais obter calibrações para determinar abundância e composição para cada fase.

Em [Cloutis et al. \(1986\)](#), os autores prepararam 73 misturas controladas de olivina-piroxênio, para quantificar assim os efeitos sobre os espectros de refletância em função da abundância em fase e do tamanho das partículas. A técnica empregada para agrupar solos em função do tamanho das partículas é a granulométrica, onde a técnica pode ser feita em um meio úmido (*wet sieved*) o em um meio seco (*dry sieved*). Então, os intervalos em tamanho de grão das amostras medidas com seu respectivo método foram: 38 – 53 μm (*wet sieved*), 63 – 90 μm (*wet sieved*), 63 – 90 μm (*dry sieved*), 90 – 125 μm (*wet sieved*).

As principais características espectrais empregadas para determinar abundância e composição são: o parâmetro BAR (do inglês, *Band Area Ratio*), que é a razão da banda II entre a banda I, e o centro da banda I, estas são definidas a seguir. A Figura 2.2 mostra todas as características espectrais consideradas pelos autores.

Área das bandas: a área da banda I é definida como a área encerrada entre a curva espectral e uma linha tangente relativa aos máximos entre 0.7 a 1.4 – 1.7 μm . A área da banda II se define como a área encerrada entre a curva espectral e a linha reta tangente entre o máximo 1.4 – 1.7 a 2.4 μm .

Centro das bandas: a curva espectral de cada banda é dividida por seu respectivo contínuo ou linha reta tangente. Depois, ajusta-se um polinômio a estas bandas, onde o centro será o ponto mínimo do polinômio.

O parâmetro BAR depende praticamente apenas função só da abundância de cada fase de mineral. A Figura 2.3 mostra a relação linear entre o parâmetro BAR e a abundância de fase, sendo esta calibração insensível ao tamanho do grão das amostras. Para um intervalo entre 10 – 90% em ortopiroxênio na mistura, a equação 2.1 de calibração é válida. A incerteza na determinação da fase em ortopiroxênio a partir de esta calibração é de $\pm 5\%$. Um ponto importante citado pelos autores, é que o coeficiente angular da equação 2.1 não muda quando se inclui uma fase metálica como NiFe.

$$\frac{\text{opx}}{\text{opx} + \text{ol}} = 0.417 \times \text{BAR} + 0.052 \quad (2.1)$$

Segundo os autores, a abundância de fase determinada a partir da razão das áreas das bandas apresenta ser independentes dos tamanhos das partículas e de sua textura. Esta independência das calibrações com respeito ao tamanho da partícula é devida as amostras de olivina e piroxênio terem distribuições de tamanho de grão similar. Segundo os autores têm muita evidencia na literatura ao respeito, como por exemplo, amostras luazes contendo grãos de olivina e piroxênio mostram similares distribuições de tamanho de grão. Para a dependência da composição na calibração, os pontos finais da calibração não parecem variar para diferentes composições para a olivina ou para diferentes fases para o ortopiroxênio. Segundo os autores, a linearidade em composição deve-se ao fato que o conteúdo de íons de ferro para a olivina e ortopiroxênio é igual e que é necessário o estudo para estes minerais com conteúdo em íons de ferro divergente.

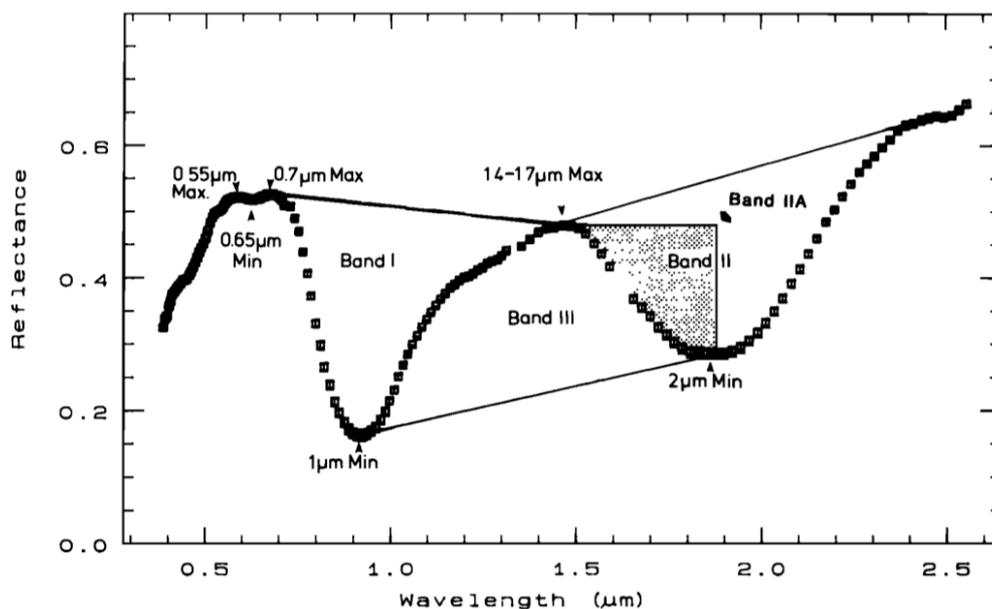


Figura 2.2: Espectro de uma mistura de olivina-ortopiroxênio 65/35, preparada com tamanho de grão entre 38 – 53 μm . As principais características espectrais são o centro da banda I e as áreas para cada banda. Figura extraída de [Cloutis et al. \(1986\)](#).

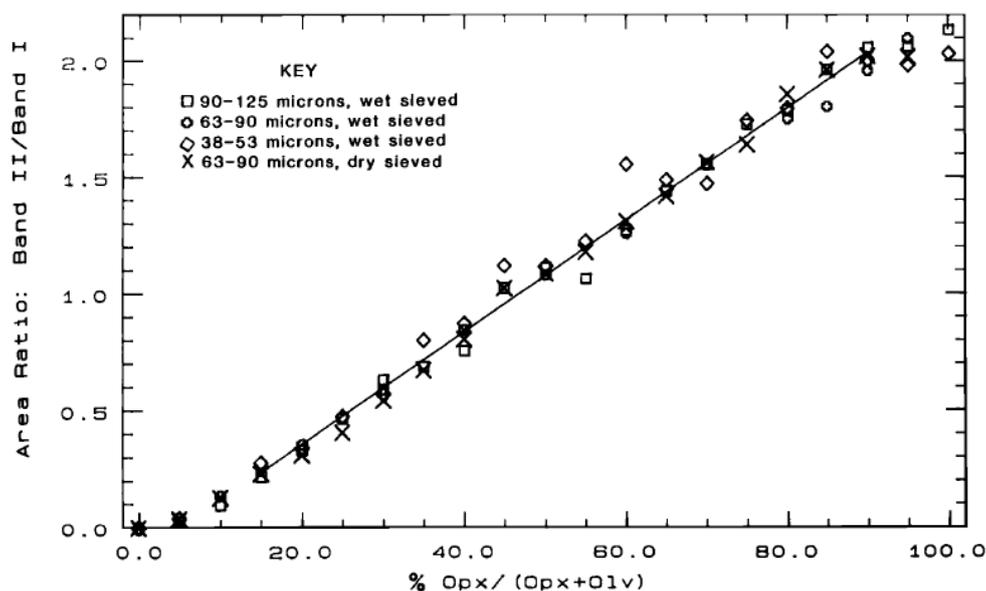


Figura 2.3: Esta figura mostra a relação linear entre a abundância de fase com respeito ao ortopiroxênio em função do parâmetro BAR, para diferentes distribuições em tamanho de grão. Figura extraída de [Cloutis et al. \(1986\)](#).

Posição da banda I, calibração para determinar a química: a posição da banda I para uma mistura de olivina e ortopiroxênio é função da abundância de cada fase e a sua composição química. Os autores determinaram a posição da banda I para fases puras de olivina e ortopiroxênio em função do conteúdo em ferro, por exemplo, o centro da banda I para a olivina com

0% em ferro é $1.055 \mu\text{m}$ e com 100% em ferro se desloca até $1.090 \mu\text{m}$; para o ortopiroxênio o centro da banda I vai desde $0.911 \mu\text{m}$ até $0.956 \mu\text{m}$ para o conteúdo em ferro entre 0 e 100% respectivamente.

Então, a partir da posição da banda I é possível determinar a química de cada fase, se primeiro é conhecido a abundancia dos minerais presentes na mistura. A Figura 2.4 mostra a variação da posição da banda I em função da abundancia de fase do ortopiroxênio. No eixo da esquerda a escala, com respeito ao conteúdo em ferro para a fase pura de olivina, que vai desde 0 a 100%; no eixo da direita tem-se o mesmo para a fase pura de ortopiroxênio. Então, a determinação em porcentagem do conteúdo em ferro para os minerais na mistura será determinada deslocando-se o gráfico verticalmente e observando-se onde caem os pontos finais na calibração em conteúdo em ferro.

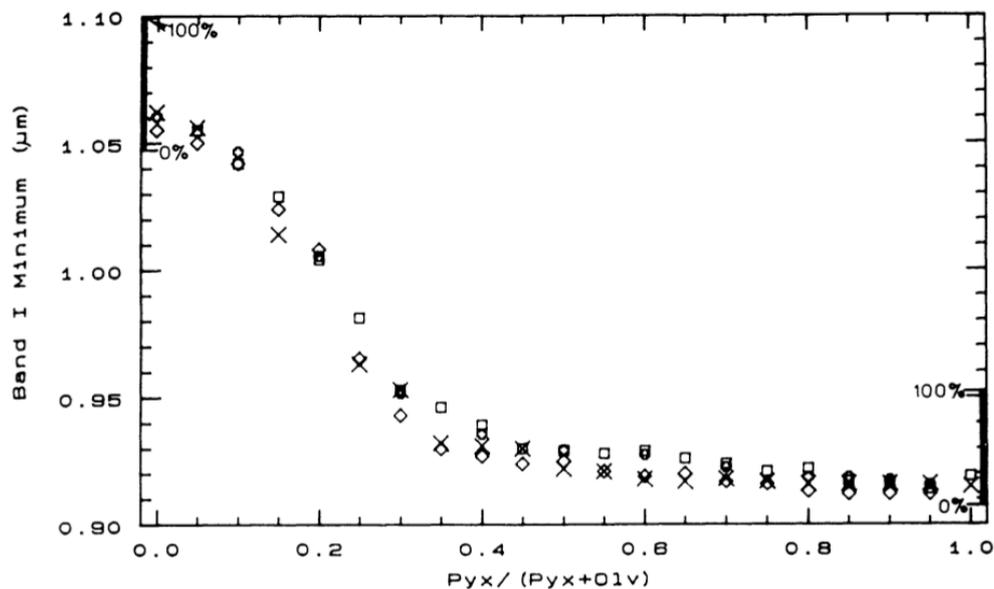


Figura 2.4: Esta figura mostra a posição da banda I versus a abundancia de fase do ortopiroxênio. Figura extraída de Cloutis et al. (1986).

Posição da banda II: também se pode ter uma calibração para a determinação do conteúdo em ferro pela posição da banda II para ortopiroxênios em misturas olivina-ortopiroxênio. Isto porque a olivina não apresenta uma segunda banda de absorção, ainda para espécies com alto conteúdo em ferro estas apresentam uma segunda banda fraca. Esta calibração é também independente da abundancia de fase e do tamanho das partículas, mas esta calibração ainda apresenta muita incerteza.

3 Modelos de transferência radiativa

O estudo de como a radiação interage com uma partícula esférica pode ser descrito através das equações de Maxwell. Esta descrição física é o ponto de partida para o estudo e compressão de como a luz interatua com um meio composto de uma variedade de partículas tanto em tamanho, forma e composição.

Regolitos são partículas da ordem de microns em tamanho que conformam a camada superficial de planetas rochosos, algumas luas, asteroides e cometas. Estas partículas são complexas tanto em tamanho, forma e composição mineralógica. Portanto, para obter informação das características superficiais a partir da luz refletida deste meio é preciso de um modelo de refletância.

Os principais modelos de refletância empregados na literatura para obter propriedades superficiais, é o modelo de refletância e emitância de [Hapke \(1993, 2012b\)](#), e o modelo de espalhamento da luz em uma dimensão de [Shkuratov and Starukhina \(1999\)](#). Tudo este trabalho está baseado no modelo de Hapke, portanto, o que segui é uma explicação do modelo, os efeitos que se incorporam e os limites para sua aplicação.

3.1 Modelo de refletância bidirecional de Hapke

O modelo aproximado de espalhamento múltiplo isotrópico (IMSA, siglas em inglês) [Hapke \(1993\)](#) e o mais recente, o modelo aproximado de espalhamento múltiplo anisotrópico [Hapke \(2002\)](#), descrevem a emissão e espalhamento da radiação eletromagnéticas através de um meio composto por partículas em tamanho maior que o comprimento de onda da radiação incidente. Este modelo está baseada, em parte, na equação de transferência radiativa, que assume que as heterogeneidades do meio espalham e emitem a radiação independente e incoerentemente. Segundo [Hapke \(1993\)](#) isto é verdade supondo um meio onde a distribuição das partículas é aleatória em posição e direção, caso contrario, a teoria deve ser aplicada com muita atenção.

A seguinte equação é a equação de refletância bidirecional obtida a partir, da equação de transferência radiativa para um meio plano semi-infinito. Esta equação não considera os termos de porosidade, os efeitos de oposição e de rugosidade. Exceto para o fenômeno de porosidade, estes efeitos não podem ser obtidos a partir da equação de transferência radiativa, os quais serão descritos mais adiante. Então a equação de refletância bidirecional é:

$$r(i, e, g) = \frac{w}{4\pi} \frac{\mu_o}{\mu_o + \mu_e} [p(g) + H(\mu_o, w)H(\mu_e, w) - 1] \quad (2.2)$$

Aqui $r = J/I$, é definido como a irradiância J , que é a potencia incidente por unidade de área, dividido entre a radiância I que é a potencia espalhada pela superfície por unidade de área e unidade de ângulo sólido; por definição J é luz colimada e I é luz não colimada; w é o albedo médio de espalhamento simples, $\mu_o = \cos i$ e $\mu_e = \cos e$ são os co-senos dos ângulos de incidência e emissão respectivamente, $p(g)$ é a função de fase média e, H é a função Ambartsumian-Chandrasekhar.

Da equação de refletância bidirecional, a contribuição ao espalhamento simples anisotrópico é:

$$\frac{w}{4\pi} \frac{\mu_o}{\mu_o + \mu_e} p(g) \quad (2.3)$$

e a parte que contribui ao espalhamento múltiplo isotrópico é:

$$\frac{w}{4\pi} \frac{\mu_o}{\mu_o + \mu_e} [H(\mu_o, w)H(\mu_e, w) - 1] \quad (2.4)$$

Antes de prosseguir com a teoria de refletância, temos que primeiro que definir as expressões básicas de espalhamento.

A seguir são definidas os conceito básicos de espalhamento: as três seções transversais, as eficiências de espalhamento, extinção e absorção, o albedo de espalhamento simples e a função de fase.

Seção transversal

A seção transversal de uma partícula esférica é a fração de área efetiva que esta afeta à radiação incidente. Então, define-se como a potencia afetada P dividida entre a irradiância incidente J . As três seções transversais são: seção transversal de extinção σ_E , de espalhamento σ_S e de absorção σ_A , e se definem como:

$$\sigma_E = P_E/J \quad (2.5)$$

$$\sigma_S = P_S/J \quad (2.6)$$

$$\sigma_A = P_A/J \quad (2.7)$$

onde as potências e as seções transversais não são independentes, elas estão relacionadas entre si definidas por: $P_E = P_S + P_A$ e, $\sigma_E = \sigma_S + \sigma_A$.

Eficiências

A eficiência de uma partícula é a fração de energia que é afetada pela partícula dividida entre sua área geométrica de seção transversal. As eficiências são: eficiência de extinção, de espalhamento e de absorção.

$$Q_E = \frac{\sigma_E}{\sigma} \quad (2.8)$$

$$Q_S = \frac{\sigma_S}{\sigma} \quad (2.9)$$

$$Q_A = \frac{\sigma_A}{\sigma} \quad (2.10)$$

onde $\sigma = \pi a^2$ é o área geométrica de seção transversal da partícula de radio a , se cumpre que:

$$Q_E = Q_S + Q_A \quad (2.11)$$

Albedo de espalhamento simples, ω

O albedo de espalhamento simples ω se define como a razão entre a potencia espalhamento dividida pela potencia de extinção.

$$\omega = \frac{P_S}{P_E} \quad (2.12)$$

das definições anteriores o albedo também pode ser escrito como a razão entre a eficiência de espalhamento dividida entre a eficiência de extinção:

$$\omega = \frac{\sigma_S}{\sigma_E} = \frac{Q_S}{Q_E} \quad (2.13)$$

as eficiências como também o albedo de espalhamento simples são funções do comprimento de onda.

Função de fase de uma partícula

Suponhamos que temos uma irradiância $J(r, \Omega_o)$ propagando-se dentro de um ângulo sólido Ω_o , esta irradiância interatua com uma partícula a uma distância r , logo, uma parte dela é espalhada como radiancia $I(r, \Omega)$ dentro de outro ângulo sólido Ω em uma direção θ com respeito à radiação de incidência. Então, para conhecer a distribuição da potência espalhada se introduz o conceito de função de fase. A função de fase $p(\theta)$ será a distribuição angular da radiação espalhada por uma partícula, definida como:

$$\frac{dP_s}{d\Omega}(\Omega_o, \Omega) = J(\Omega_o)\sigma Q_s \frac{p(\theta)}{4\pi} \quad (2.14)$$

Onde θ é o ângulo entre a direção de propagação da radiação incidente e a direção da radiação espalhada, mas, também pode ser expresso em função do ângulo de fase g , que é o ângulo entre a fonte e o detector medido desde o centro da partícula então, $g = \pi - \theta$ e, a função de fase será $p(g) = p(\pi - \theta)$. Integrando esta equação sobre Ω , e exigido que $p(g)$ satisfaça a condição de normalização então $(1/4\pi) \int p(g)d\Omega = 1$. Se a partícula espalha a radiação isotropicamente, temos que $p(g) = 1$.

Comparação entre a teoria de Mie e a óptica geométrica

O problema da interação de uma onda eletromagnética com uma esfera foi resolvido por Gustav Mie empregando as equações de Maxwell. A teoria de Mie encontra as expressões para as eficiências de extinção e espalhamento, como também, a função de fase para uma esfera isolada perfeita de qualquer tamanho. As eficiências como a função de fase só dependem de duas quantidades: a constante óptica e , (2) do parâmetro de tamanho, definido como $X = 2\pi a/\lambda$, onde a é o radio da esfera e, λ é o comprimento de onda. As soluções de estes parâmetros têm diferentes propriedades dependendo si X é menor, igual ou maior que a unidade.

Quando $X \gg 1$ as expressões de espalhamento, extinção e a função de fase, podem ser descritas aproximadamente bem por meio da óptica geométrica, isso é de importância, já que, as varias expressões do modelo de Hapke são obtidas baseadas na óptica geométrica.

Na teoria de Mie a equação de onda é resolvida em coordenadas esféricas, com o centro de

coordenadas no centro da esfera e, o eixo do pólo na mesma direção que a radiação incidente. Para determinar soluções físicas do campo incidente como o espalhado devem de cumprir certas regras: (1) que o campo deve de ser finito no todo o espaço, (2) só a irradiância incidente é o único campo dentro a esfera e, (3) os campos tanto elétrico como o magnético devem de ser contínuos na superfície de esfera. Então, depois de escrever os campos em função de coordenadas esféricas e resolver para as condições de contorno, Mie encontra as expressões para as eficiências de extinção e dispersão, como também para a função de fase.

A Figura 2.5 mostra a função de fase obtido pela teoria de Mie para uma esfera transparente com índice de refração $m = 1.50 + i0$ e, para uma esfera opaca com índice de refração $m = 1.50 + i0.25$, ambas com parâmetro de tamanho $X = 100$. Para uma esfera isolada, tem-se contribuição do fenômeno de difração ao término de espalhamento, como pode ser observado na curva da função de fase em 180° . A seguinte Figura 2.6 é a função de fase para uma esfera transparente com o mesmo parâmetro de tamanho, obtida por meio da ótica geométrica, onde se observa que os fenômenos de reflexão e refração contribuem a regiões específicas da função de fase. Segundo Hapke (1993), os dois resultados, um obtido resolvendo a equação de Maxwell e o outro empregando a ótica geometria são qualitativamente similares, onde as principais diferenças são associadas a picos de ressonância e que, em geral, o resultado obtido por meio da ótica geométrica é aceitável.

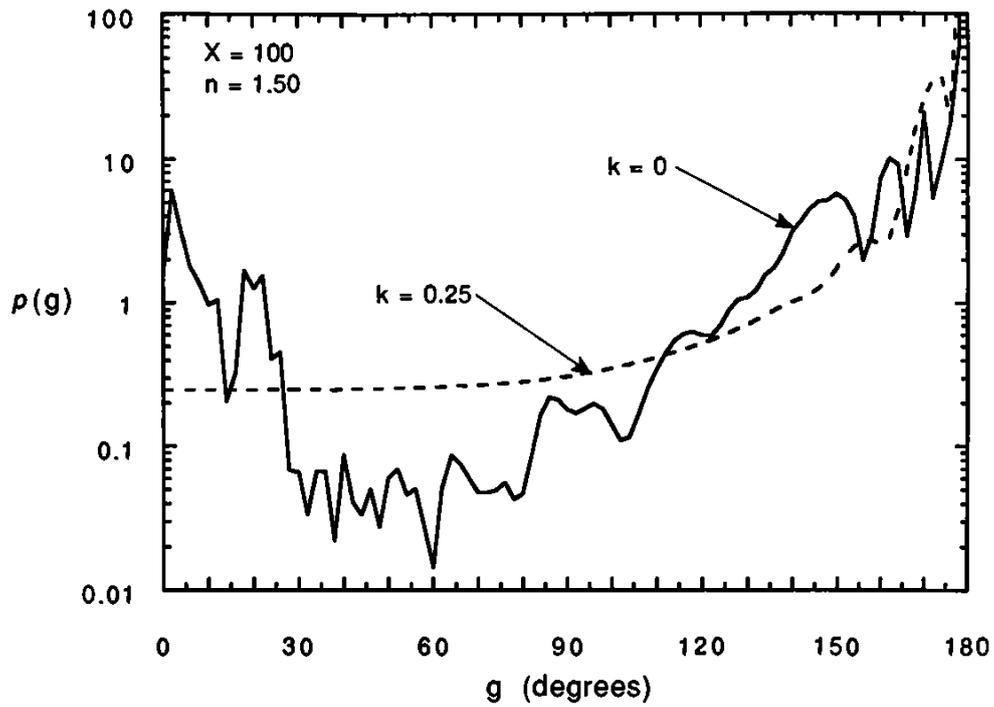


Figura 2.5: Função de fase obtida a partir da teoria de Mie, para partículas esféricas com parâmetro de tamanho $X = 100$, para constantes óticas $m = 1.50 + i0$ e $m = 1.50 + i0.25$. Pode-se observar a contribuição do fenômeno de difração, o pico perto de 180° . Figura extraída de [Hapke \(1993\)](#).

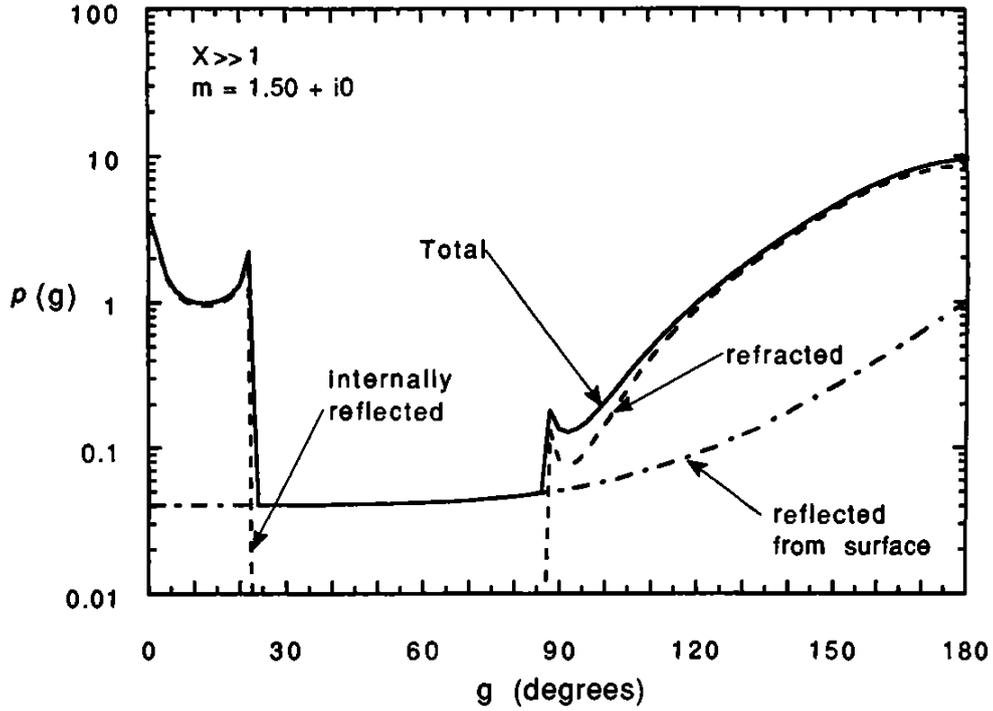


Figura 2.6: Função de fase obtida a partir da ótica geométrica para uma esfera transparente com constante ótica $m = 1.50 + i0$ e parâmetro de tamanho de $X = 100$. Onde os fenômenos à contribuição da função de fase são os fenômenos de reflexão e refração. Figura extraída de [Hapke \(1993\)](#).

Determinação das eficiências por meio do equivalente *slab*

Já que o modelo de Hapke considera as partículas maiores que o comprimento de onda da radiação incidente, então, nesta região, a ótica geometria é válida e é possível obter expressões analíticas matematicamente simples para as eficiências modelando uma partícula esférica como um *slab* (Figura 2.7) com as mesmas propriedades óticas. Então para luz incidente não polarizada, a fração de luz que é refletida da superfície do *slab* será a integral dos coeficientes de reflexão de Fresnel S_e , onde $1 - S_e$ será a fração de luz transmitida e atenuada por absorção através do *slab*.

Define-se o fator de transmissão interna Θ , como a fração total de luz que entra na partícula alcançando a outra superfície depois de um trânsito.

$$\Theta = 2 \int_{\vartheta=0}^{\vartheta/2} e^{-4n_i X \cos \vartheta'} \sin \vartheta \cos \vartheta d\vartheta \quad (2.15)$$

aqui n_i é o índice de refração imaginário, $X = 2\pi a/\lambda$ é o parâmetro de tamanho, a é o raio da esfera e λ é o comprimento de onda, ϑ' e ϑ são os ângulos de refração e reflexão

respectivamente. Então, integrando 2.15 o valor exato é:

$$\Theta = \frac{2n_r^2}{(\alpha D)^2} \{e^{-\alpha D(1-1/n_r^2)^{1/2}} [1 + \alpha D(1-1/n_r^2)^{1/2}] - e^{-\alpha D} [1 + \alpha D]\} \quad (2.16)$$

aqui n_r é o índice de refração real, D é o diâmetro da partícula e, o $\alpha = 4\pi n_i/\lambda$ é o coeficiente de absorção. Uma aproximação para Θ , denominado como modelo exponencial é:

$$\Theta \approx e^{-\alpha \langle D \rangle} \quad (2.17)$$

onde $\langle D \rangle = \frac{2}{3} [n_r^2 - \frac{1}{n_r} (n_r^2 - 1)^{3/2}] D$ é a distancia média percorrida por todos os raios durante um simples transito.

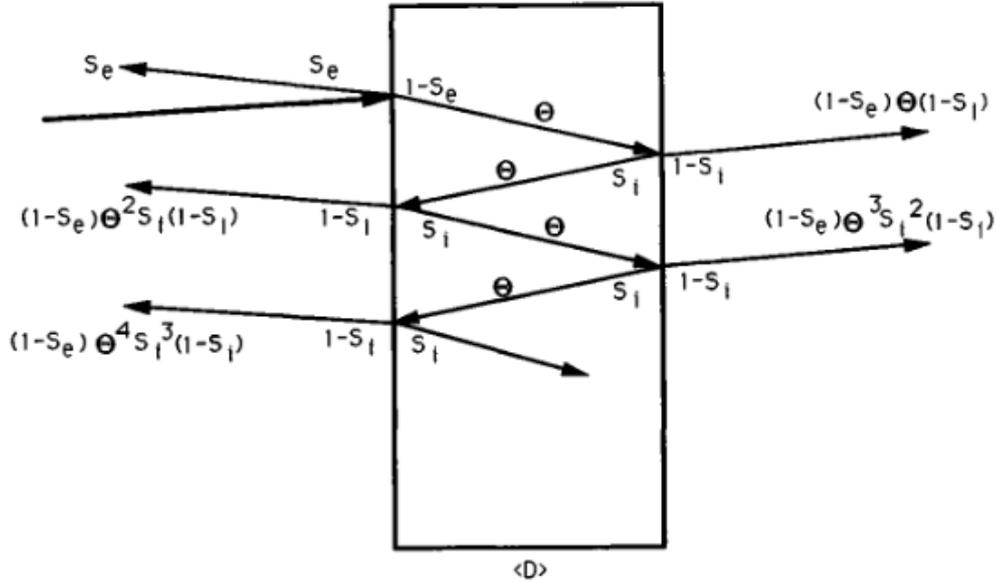


Figura 2.7: Equivalente *slab* para uma partícula de tamanho maior que o comprimento de onda, figura extraída de Hapke (1993).

A fração total de luz que é refletida specularmente da superfície de uma partícula esférica é S_e , onde $1 - S_e$ é a fração de luz que é transmitida e atenuada pelo fator Θ quando alcança a superfície oposta. S_i é a fração de luz refletida dentro do *slab*, e $1 - S_i$ é a fração que é transmitida. Então, somando toda a contribuição da luz, temos que a eficiência de espalhamento sem componente de difração é:

$$Q_s = S_e + (1 - S_e) \frac{1 - S_i}{1 - S_e \Theta} \Theta \quad (2.18)$$

onde:

$$S_e = \int_0^{\pi/2} [R_{\perp}(\theta) + R_{\parallel}(\theta)] \cos \theta \sin \theta d\theta \quad (2.19)$$

$$S_i = \int_0^{\pi/2} [R_{\perp}(\theta') + R_{\parallel}(\theta')] \cos \theta' \sin \theta' d\theta' \quad (2.20)$$

Onde θ' é o ângulo de incidência dentro do *slab*, R_{\perp} e R_{\parallel} são os coeficientes de reflexão perpendicular e paralelo respectivamente com respeito à fronteira que separa dois meios. Estes coeficientes estão em função das intensidades dos campos elétricos. Na literatura se têm varias expressões aproximadas para os coeficientes S_e e S_i . Aqui empregamos as expressões dadas por [Hapke \(2012b\)](#) quais são:

$$S_e = 0.0587 + 0.8543R(0) + 0.0870R(0)^2 \quad (2.21)$$

$$S_i = 1 - \frac{1}{n_r^2} [0.9413 - 0.8543R(0) - 0.0870R(0)^2] \quad (2.22)$$

onde:

$$R(0) = \frac{(n_r - 1)^2 + n_i^2}{(n_r + 1)^2 + n_i^2} \quad (2.23)$$

Partículas naturais não são transparentes e estas possuem impurezas, estas impurezas fazem que a radiação não alcance o extremo oposto da partícula e seja espalhada, por exemplo, para trás. Então a presença de espalhadores internos em partículas naturais faz que a função de fase seja modificada, diminuindo a contribuição a altos ângulos de fase e incrementando-se a contribuição da radiação espalhada a baixos ângulos de fase. Por tanto, quando se tem espalhadores internos o fator de transmissão interno queda definido como:

$$\Theta = \frac{r_i + \exp(-\sqrt{\alpha(\alpha + s)}\langle D \rangle)}{1 + r_i \exp(-\sqrt{\alpha(\alpha + s)}\langle D \rangle)} \quad (2.24)$$

onde s é o coeficiente de espalhamento interno e r_i está definido como:

$$r_i = \frac{1 - \sqrt{\alpha/(\alpha + s)}}{1 + \sqrt{\alpha/(\alpha + s)}} \quad (2.25)$$

Como mencionado, esta eficiência de espalhamento não inclui o termo de difração. O fenômeno de difração é devido à natureza ondulatória da luz. O padrão de difração é formado pela interferência construtiva e destrutiva da onda incidente sobre a partícula. Portanto, para um meio formado por partículas muito próximas entre si, o desvio angular da radiação incidente será mínimo pela proximidade das partículas, então, o padrão de interferência não será formado e, este efeito não será observável. Este é discutido em [Hapke \(1999\)](#).

Portanto, como não se tem contribuição por difração para um meio formado por partículas, a eficiência de extinção será $Q_E = 1$. Como o albedo de espalhamento simples está definido por $\omega = Q_S/Q_E$, o albedo de espalhamento simples será igual à eficiência de espalhamento; já o albedo de espalhamento simples estará dado pela equação [2.18](#) e será:

$$\omega = S_e + (1 - S_e) \frac{1 - S_i}{1 - S_e \Theta} \Theta \quad (2.26)$$

A [Figura 2.8](#) mostra a comparação entre a eficiência de espalhamento obtido pela óptica geométrica e o equivalente *slab*, as curvas estão sobrepostas, mostrando assim que a expressão analítica obtida modelando uma partícula por meio de um *slab* (equação [2.18](#)), é uma boa aproximação para o cálculo das eficiências sem componente de difração, para partículas maiores que o comprimento de onda.

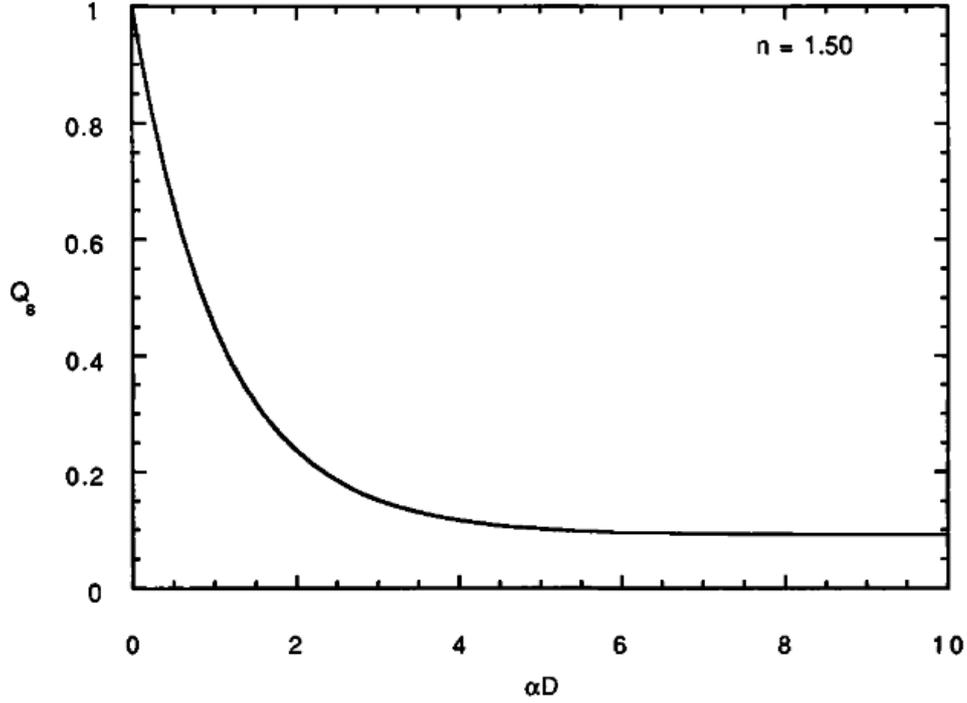


Figura 2.8: A figura mostra a eficiência de espalhamento contra αD , obtidas por meio da ótica geométrica e o equivalente *slab*, para uma constante ótica de $m = 1.50 + i0$, figura extraída de [Hapke \(1993\)](#).

Para uma mistura íntima de partículas, que quer dizer, uma superfície composta por partículas de tipos diferentes e misturadas homogeneamente, o albedo médio de espalhamento simples e a função de fase média são definidas como:

$$w = \frac{\sum_j N_j \sigma_j Q_{Ej} \omega_j}{\sum_j N_j \sigma_j Q_{Ej}} \quad (2.27)$$

$$p(g) = \frac{\sum_j N_j \sigma_j Q_{Sj} p_j(g)}{\sum_j N_j \sigma_j Q_{Sj}} \quad (2.28)$$

onde ω_j é o albedo de espalhamento simples para uma partícula do tipo j , Q_{Sj} e Q_{Ej} são as eficiências de espalhamento e extinção da partícula de tipo j respectivamente, σ_j é o área de seção transversal da partícula de tipo j , N_j é o número de partículas de tipo j por unidade de volume.

Expressão empírica para a função de fase $p(g)$

O seguinte a definir é a função de espalhamento angular volumétrico médio ou função de fase. Esta função representa o espalhamento angular médio de todos os tipos diferentes de partículas

no meio, incluindo tamanho, estrutura e composição. Na literatura se têm varias expressões empíricas para a função de fase $p(g)$, cada um, por exemplo, se diferenciam no número de variáveis livres. Pode-se dizer, que a função de fase empírica mais empregada é a função de fase double Henyey-Greenstein ([Henyey and Greenstein, 1941](#)), com dois parâmetros livres. Esta função de fase empírica é uma aproximação razoável para superfícies que espalham a luz no intervalo do visível ao infravermelho próximo e é definida como:

$$p(g) = \frac{1+c}{2} \frac{1-b^2}{(1-2b \cos g + b^2)^{3/2}} + \frac{1-c}{2} \frac{1-b^2}{(1+2b \cos g + b^2)^{3/2}} \quad (2.29)$$

As duas variáveis livres são b e c , onde g é o ângulo de fase, ângulo formado entre a irradiância incidente e a radiância espalhada. O parâmetro b descreve a altura e largura dos lóbulos, restrito no intervalo $0 \leq b \leq 1$. O parâmetro c representa a distribuição de energia entre os lóbulos, restrito pela condição de que $p(g)$ não pode ser negativo.

Segundo o estudo de [McGuire \(1993\)](#) sobre vários tipos de partículas, partículas esferoidais transparentes têm valores de b entre 0.5 – 0.7 e c aproximadamente -0.9 e, para partículas opacas o valor de b decresce levemente, mas, não se observa variação importante em c . Para partículas irregulares, b decresce e c se incrementa. A Figura 2.9 mostra o comportamento das funções de fase para os dois tipos de partículas. A função de fase para partículas transparentes mostram um segundo lóbulo alto e estreito. Diz-se que, partículas transparentes espalham a luz na direção da radiação incidente e, partículas opacas espalham a luz na direção oposta.

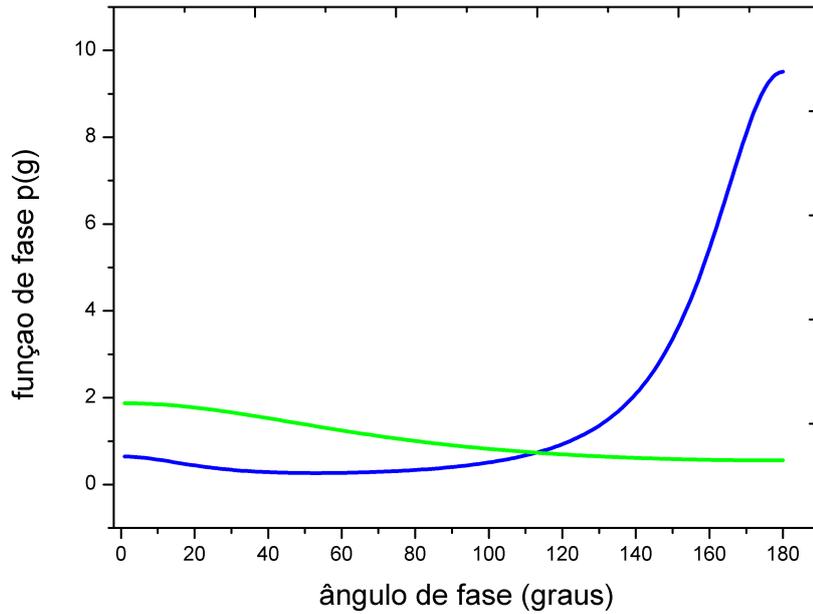


Figura 2.9: Aqui se têm dois funções de fase, a linha de cor azul apresenta a função de fase para partículas transparentes com valores de $b = 0.6$ e $c = -0.9$. A linha de cor verde será o perfil da função de fase para partículas opacas com $b = 0.2$ e $c = 1.0$.

Em [McGuire and Hapke \(1995\)](#), os autores prepararam 42 partículas e determinaram os parâmetros b e c , ajustando a função de fase double Henyey-Greenstein aos seus dados. Os autores notaram que quando se esquematiza b contra c , estes mostram uma relação inversa, onde os pontos parecem estar restrito a uma determinada área e não espalhados. Mais adiante, em [Hapke \(2012a\)](#), trabalhou com uma amostra muito maior, 495 medidas de refletância de variadas amostras de laboratório e espectros de superfícies naturais (Figura 2.10a). Para poucos casos os parâmetros b e c foram obtidos diretamente obtendo medidas de refletância de partículas isoladas ([Shkuratov et al., 2007](#)). A Figura 2.10b mostra os valores de b contra c , onde a linha é o ajuste a centróide dos dados. Dentro dos limites de $0 < b < 1$ e $-1 < c < 1.5$ o centróide pode ser escrito pela função empírica 2.30. Segundo [Hapke](#), esta equação pode representar a relação física entre as distribuições de energia dos dois lóbulos da função de fase para partículas planetárias.

$$c = 3.29 \exp(-17.4b^2) - 0.908 \quad (2.30)$$

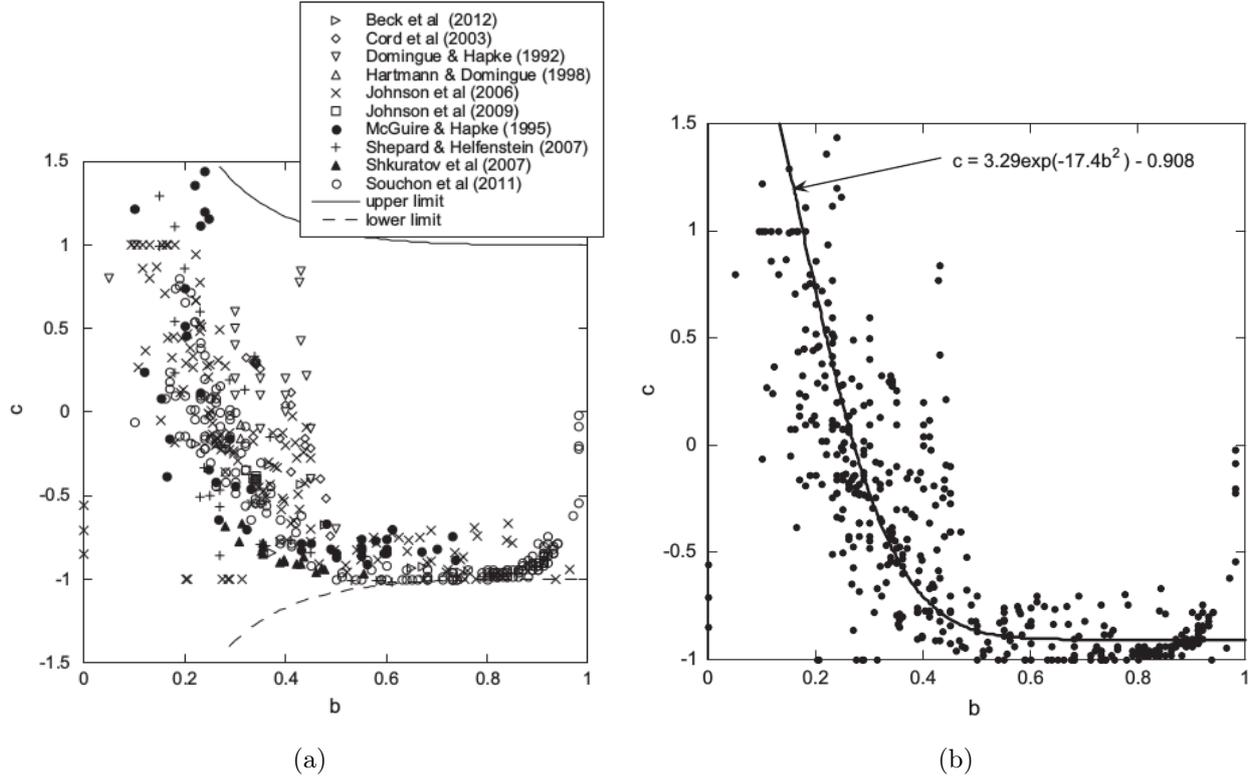


Figura 2.10: Figura (a) mostra os dados de b e c obtidos diretamente e indiretamente de 495 espectros. A Figura (b) mostra o ajuste a centroide das medidas, figura extraída de [Hapke \(2012a\)](#).

Em [Hapke \(2012b\)](#) deriva uma expressão para a constante c em função das eficiências, isto quer dizer que esta constante está em função das propriedades óticas do meio, como do tamanho das partículas:

$$c = \frac{\Delta Q_s}{Q_s} \quad (2.31)$$

onde:

$$\Delta Q_s = S_e + (1 - S_e) \frac{1 - S_i}{1 - S_i \Psi} \Psi \quad (2.32)$$

$$\Psi = \frac{r_i - \exp(-\sqrt{\alpha(\alpha + s)} \langle D \rangle)}{1 - r_i \exp(-\sqrt{\alpha(\alpha + s)} \langle D \rangle)} \quad (2.33)$$

Efeito de Porosidade

[Hapke \(2008\)](#) modifica a equação de transferência radiativa para determinar a refletância bi-direcional dependente da porosidade do meio, para isso assume um meio quase - contínuo

formado por camadas discretas, onde cada camada contém partículas de tamanho maior que o comprimento de onda da radiação incidente, orientadas e localizadas de forma aleatória. Essas partículas são diferentes em tamanho, forma e composição. Não é considerado efeitos de coerência porque é assumido que as distâncias entre as partículas são maiores que seu diâmetro e o comprimento de onda.

O coeficiente de transmitância $T(s)$ de um meio contínuo é $T(s) = \exp(-Es)$, onde E é o coeficiente de extinção e s é a distância percorrida pela luz dentro de meio. Em [Hapke](#) corrige este coeficiente para um meio discreto considerando que o meio está formado por uma rede cúbica imaginária de longitude L , onde cada cubo têm uma única partícula: isto evita sobreposição. Então, a fração de intensidade que é transmitida através da primeira rede de partículas é $\frac{\Delta I}{I} = 1 - EL$.

Como as posições das partículas são aleatórias, a probabilidade de transmissão da luz através das redes é a mesma, portanto, o coeficiente T a uma distância s é:

$$T(s) = (1 - EL)^N \quad (2.34)$$

onde $N = s/L$, que é o número de camadas de partículas.

O coeficiente T também pode ser escrito como:

$$T(s) = \exp(-KEs) \quad (2.35)$$

onde $K = -\ln(1 - EL)/EL$

A Figura 2.11a mostra a variação da transmitância contra o número de camadas de partículas, primeiro para o meio contínuo, segundo para as duas expressões para um meio discreto. Aqui o coeficiente T cai mais depressa para um meio discreto que para um meio contínuo e, para as camadas superficiais, um meio discreto recebe mais irradiância que um meio contínuo. A Figura 2.11b mostra a região onde o modelo é válido, que é debaixo da curva dada pela seguinte equação:

$$\phi = \frac{0.524}{(1 + \lambda/D)^3} \quad (2.36)$$

ϕ é o fator de preenchimento para partículas equantes, λ é o comprimento de onda e D é o diâmetro das partículas na rede cúbica imaginária. Segundo esta equação para grandes partículas os fenômenos de coerência não podem ser descartados para valores de $\phi > \sim 50\%$.

Na região entre a curva dada pela equação 2.36 e $\phi = 1$ o número de espalhamento por partícula diminui e a função de fase tem uma maior contribuição para grandes ângulos de fase, isto faz com que a refletância mude.

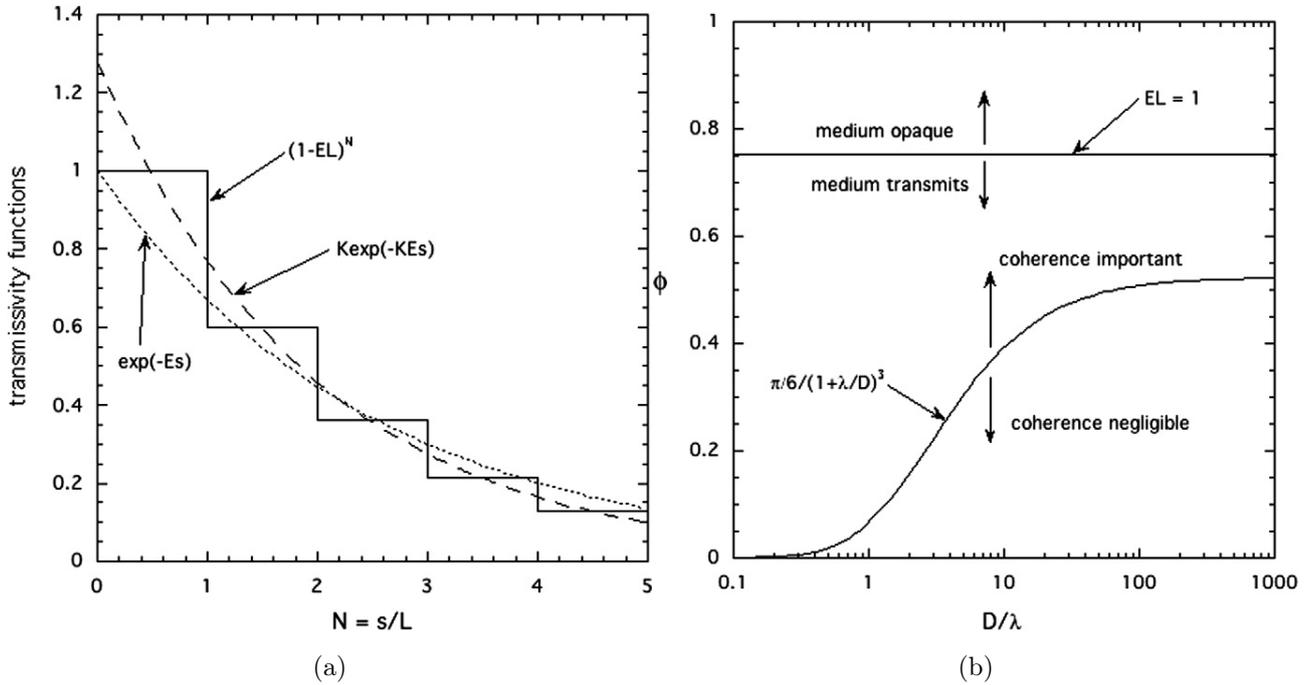


Figura 2.11: (a) é a transmitância versus o número de camadas de partículas, para um meio contínuo e discreto. (b) é o fator de preenchimento versus D/λ , mostrando as regiões onde o efeito de coerência é importante e onde o meio será opaco. Figura extraída de Hapke (2008).

Hapke resolve a equação de transferência radiativa considerando o efeito de porosidade no termo de transmitância escrita como: $T(z/\mu_0) = K \exp(-K\tau/\mu_0)$. A equação de refletância bidirecional considerando a porosidade do meio é expressado como:

$$r(i, e, g) = K \frac{w}{4\pi} \frac{\mu_o}{\mu + \mu_o} [p(g) + H(\mu_o)H(\mu) - 1] \quad (2.37)$$

onde:

$$H(x) = \frac{1 + 2x/K}{1 + 2\gamma x/K}$$

$$\gamma = \sqrt{1 - w}$$

$$K = -\ln(1 - 1.209\phi^{2/3})/1.209\phi^{2/3}$$

Efeito de Rugosidade Macroscópica

Até agora considerou-se um meio plano e liso que absorve e espalha a radiação; em seguida, será tomado em conta as irregularidades ou rugosidades que podem ser observadas nas superfícies dos planetas rochosos, em algumas luas, asteroides e cometas. As irregularidades na superfície produzem sombra sobre outras partes da superfície, portanto, estas superfícies em sombra não contribuiriam à radiação espalhada até o detector e, ademais, este efeito de sombra será maior quando a superfície é iluminada e observada perto do horizonte e, será desprezível quando a superfície é iluminada e observada a pequenos ângulos de fase.

A literatura apresenta vários parâmetros para caracterizar ou quantificar a rugosidade em superfícies, cito a seguir alguns destes parâmetros do trabalho de [Shepard et al. \(2001\)](#): (1) o RMS-*height* ξ , é definido como o valor quadrático médio da altura $z(x_i)$ do perfil. O perfil será definido como um mapa bidimensional mostrando a variação da altura z da superfície em função da distância x (ver Figura 2.12). (2) RMS-*deviation* $\nu(\Delta x)$, é definida como a diferença da RMS-*height* para pontos separados por um passo Δx . (3) RMS-*slope* s_{rms} é a RMS *deviation* dividida pelo tamanho de passo Δx , que usualmente é reportado em graus como $\theta_{rms} = \tan^{-1}(s_{rms})$, (4) *longitude de autocorrelação* l , é a covariância entre perfis mas, deslocada um passo em Δx . Superfícies lisas terão uma alta autocorrelação e superfícies rugosas uma baixa autocorrelação. (5) *inclinação efetiva* S_{eff} , se define como a RMS-*height* dividido pela longitude de autocorrelação $s_{eff} = \xi/l$. (6) *mediana e inclinação absoluta*, a inclinação absoluta s_{abs} é definida para evitar o bias ao medir a inclinação da superfície enquanto, a mediana da inclinação s_{med} é a mediana da inclinação absoluta. (7) *espectro de potencia*, o espectro de potencia de um perfil é aproximadamente linear em escala logarítmica, onde a inclinação e o intercepto de uma reta ajustada, são interpretados como parâmetros de rugosidade.

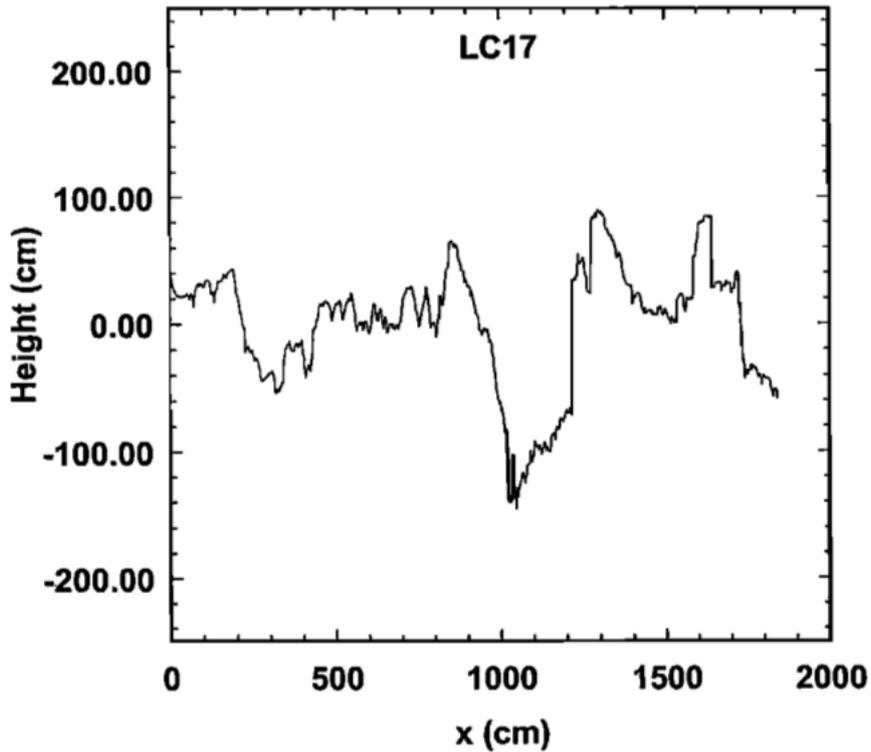


Figura 2.12: Esta figura mostra 18 metros de perfil de rugosidade medidos de um cratera vulcânica no estado de Nevada-EU. Figura extraída de [Shepard et al. \(2001\)](#).

O modelo de rugosidade macroscópica de [Hapke](#) está baseado nas seguintes suposições:

1. A ótica geométrica é válida. E se o meio inclui partículas em tamanho menor que o comprimento de onda da radiação incidente então, será as agrupações das partículas que controlaram o espalhamento da radiação.
2. A rugosidade macroscópica é modelada por meio de facetas inclinadas e lisas, onde a escala em tamanho é maior que o tamanho médio das partículas que conformam a superfície.
3. O ângulo médio de inclinação $\bar{\theta}$ é assumido ser pequeno. Assim, o modelo não considera partes das superfícies com altas inclinações.
4. O espalhamento múltiplo entre facetas não é tomado em conta. Mas sim, o espalhamento múltiplo entre partículas de uma mesma faceta.

[Hapke](#) modela a rugosidade macroscópica considerando facetas lisas e inclinadas em uma variedade de ângulos. Assume uma distribuição gaussiana para as inclinações das facetas onde a normal às facetas esta dada por uma função de distribuição de inclinação $a(\vartheta)$ dependente só do ângulo zenital. Então, para caracterizar a rugosidade da superfície considera o parâmetro chamado de ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$, a tangente do parâmetro esta definida como:

$$\tan \bar{\theta} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} a(\vartheta) \tan \vartheta d\vartheta \quad (2.38)$$

$\bar{\theta}$ é o ângulo de inclinação média sobre todas as distância na superfície. A escala em distância que cubre a equação 2.38, será limitada pela física da equação de transferência radiativa, onde o elemento de volume considerado é varias vezes o tamanho das partículas. Portanto, o limite inferior será da ordem de um milímetro, e o limite superior esta dada pela resolução do detector, que em ciências planetárias vá desde metros até quilômetros.

Como as facetas podem fazer sombra umas sobre outras e também ter inclinações fora da vista do detector ou a fonte, portanto, Hapke define em geral dois tipos de sombras, (1) algumas facetas podem ter inclinações maiores que 90° com respeito tanto ao detector quanto à fonte, este tipo de sombra é chamada de *tilt shadow*, (2) partes da superfície podem bloquear a luz em alcançar outras partes da superfície, ou que bloqueiam a radiação refletida há o detector, este tipo de sombra é a *projected shadow*. Para quantificar estes efeitos Hapke define uma função de sombra $S(i, e, \psi)$, onde i é o ângulo de incidência com respeito à normal da superfície, e é o ângulo de emissão, e ψ é o ângulo azimutal que se forma ao projetar os planos de incidência e emissão. Esta função de sombra é proporcional à probabilidade que uma faceta seja iluminada e visível ao mesmo tempo. Hapke da duas soluções para a função de sombra dependendo de se $i \geq e$ ou $i \leq e$, como também dos co-senos efeitos de incidência e emissão, μ_{0e} e μ_e respectivamente.

Então a refletância bidirecional de uma superfície que apresenta rugosidade r_R será definida por sua função de sombra vezes a refletância bidirecional de uma superfície lisa de área efetiva A_e , esta área está em função da área de cada faceta vezes sua função de inclinação. A refletância da superfície efetiva terá uma inclinação que é função dos ângulos efetivos de incidência e emissão. Então a refletância medida é:

$$r_R(i, e, g) = S(i, e, \psi)r(i_e, e_e, g) \quad (2.39)$$

Para o caso que $i \leq e$, as soluções aproximadas para $S(i, e, \psi)$, μ_{0e} e μ_e (onde $\mu_{0e} = \cos i_e$, $\mu_e = \cos e_e$) são:

$$S(i, e, \psi) = \frac{\mu_e}{\mu_e(0)} \frac{\mu_0}{\mu_{0e}(0)} \frac{\chi(\bar{\theta})}{1 - f(\psi) + f(\psi)\chi(\bar{\theta})(\mu_0/\mu_{0e}(0))} \quad (2.40)$$

aqui a função $f(\psi)$ é a fração de sombra projetada por uma faceta iluminada pela fonte com

respeito à sombra que é ocultada ao detector. Esta função é definida como:

$$f(\psi) = \exp\left(-2 \tan \frac{\psi}{2}\right) \quad (2.41)$$

onde ψ é o ângulo azimutal. Analisando os casos extremos de visada temos que: para $\psi = 0$ se tem que $f(0) = 1$, neste caso toda a sombra que é projetada devido a que a luz é bloqueada ('sombra iluminada') estará oculta pela sombra que é visível ao observador ('sombra visível'). Para $\psi = \pi$ temos que $f(\pi) = 0$ a 'sombra iluminada' é totalmente visível ao detector.

A função $\chi(\bar{\theta})$ esta definida por:

$$\chi(\bar{\theta}) = \frac{1}{\sqrt{1 + \pi \tan^2 \bar{\theta}}} \quad (2.42)$$

os co-senos efeitos de incidência μ_{0e} e emissão μ_e são:

$$\mu_{0e} = \chi(\bar{\theta}) \left[\cos i + \sin i \tan \bar{\theta} \frac{\cos \psi E_2(e) + \sin^2(\psi/2) E_2(i)}{2 - E_1(e) - (\psi/\pi) E_1(i)} \right] \quad (2.43)$$

$$\mu_e = \chi(\bar{\theta}) \left[\cos e + \sin e \tan \bar{\theta} \frac{E_2(e) + \sin^2(\psi/2) E_2(i)}{2 - E_1(e) - (\psi/\pi) E_1(i)} \right] \quad (2.44)$$

aqui $E_1(x)$ e $E_2(x)$, para $x = i$ ou $x = e$ são:

$$E_1(x) = \exp\left(-\frac{2}{\pi} \cot \bar{\theta} \cot x\right) \quad (2.45)$$

$$E_2(x) = \exp\left(-\frac{1}{\pi} \cot^2 \bar{\theta} \cot^2 x\right) \quad (2.46)$$

Para o caso $i \geq e$, a função de sombra e os co-senos efeitos serão:

$$S(i, e, \psi) = \frac{\mu_e}{\mu_e(0)} \frac{\mu_0}{\mu_{0e}(0)} \frac{\chi(\bar{\theta})}{1 - f(\psi) + f(\psi)\chi(\bar{\theta})(\mu/\mu_e(0))} \quad (2.47)$$

$$\mu_{0e} = \chi(\bar{\theta}) \left[\cos i + \sin i \tan \bar{\theta} \frac{E_2(i) - \sin^2(\psi/2) E_2(e)}{2 - E_1(i) - (\psi/\pi) E_1(e)} \right] \quad (2.48)$$

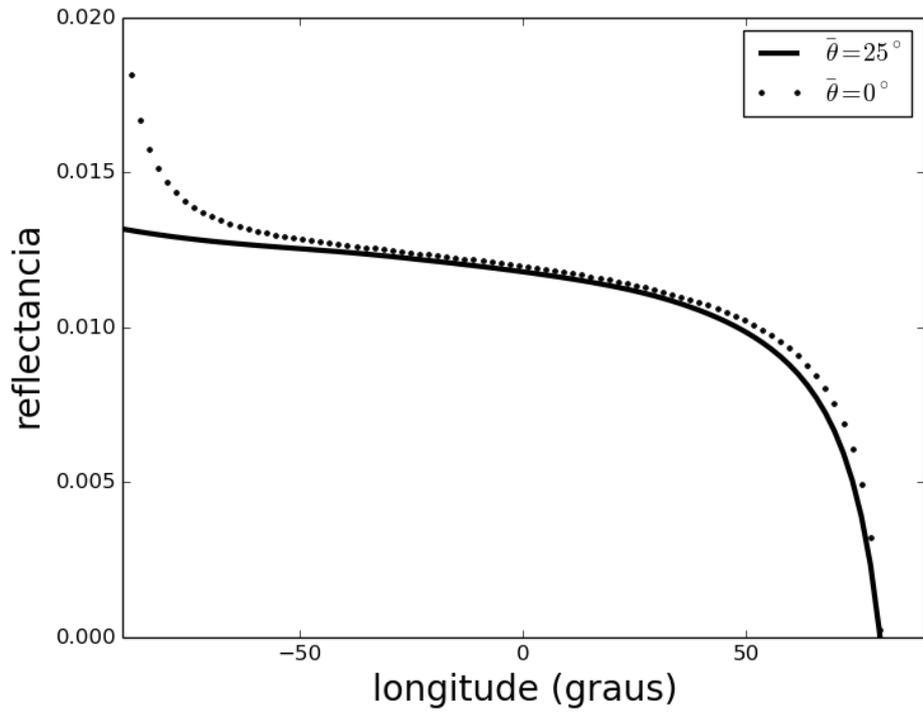
$$\mu_e = \chi(\bar{\theta}) \left[\cos e + \sin e \tan \bar{\theta} \frac{\cos \psi E_2(i) + \sin^2(\psi/2) E_2(e)}{2 - E_1(i) - (\psi/\pi) E_1(e)} \right] \quad (2.49)$$

a função $f(\psi)$ tem a mesma forma, só que agora será a fração de sombra que é oculta ao detector com respeito à sombra projetada pela fonte.

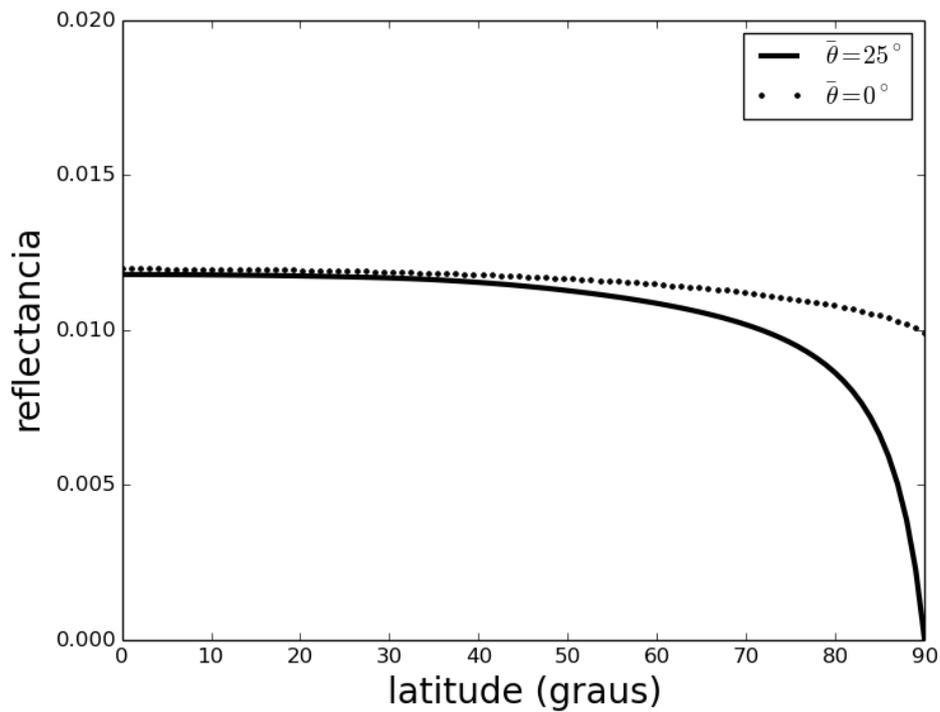
A equação refletância bidirecional de Hapke, considerando o efeito de rugosidade da superfície caracterizado pelo ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$, é:

$$r_R(i, e, g) = \frac{\varpi}{4\pi} \frac{\mu_{0e}}{\mu_{0e} + \mu_e} [p(g) + H(\mu_{0e})H(\mu_e) - 1] S(i, e, \psi) \quad (2.50)$$

Nas Figuras 2.13 (a) e (b) mostram a variação da refletância em função da longitude e latitude para um planeta esférico, respectivamente. Ambas as figuras são geradas para um mesmo ângulo de fase de 10° . Segundo Hapke (1993) no cálculo da refletância não se leva em conta o termo de espalhamento múltiplo. A linha cheia é gerado com um ângulo de inclinação média de $\bar{\theta} = 25^\circ$ e a linha cortada para $\bar{\theta} = 0^\circ$, esta última não toma em conta o efeito de rugosidade. A curva da Figura 2.13 (a) que apresenta rugosidade, mostra uma menor refletância e a separação da curva é mais quando aumenta a longitude há ângulos negativos. Para a Figura 2.13 (b) a refletância para a curva cheia se aparta da curva que não considera rugosidade e, a sua refletância vai diminuindo há o pólo do planeta, até alcançar o zero em refletância.



(a)



(b)

Figura 2.13: Reprodução parcial das figuras de [Hapke \(1993\)](#) que mostram o efeito da rugosidade macroscópica sobre o perfil de brilho de um planeta esférico com baixo albedo $w = 0.25$. As Figuras (a) e (b) mostram a variação da refletância em função da longitude e latitude para dois valores de $\bar{\theta}$ respectivamente.

Como o estudado nesta parte, a equação de refletância de Hapke se aplica a um elemento de superfície, enquanto o que se observa em corpos do Sistema Solar é a soma da radiação refletida dos elementos da superfície sobre a forma do corpo. Então, no Capítulo 5 desenvolvemos o método para analisar o efeito que pode ter a forma do corpo sobre o espectro observado. Este não é um efeito que é somado na equação de Hapke como os citados acima, aqui a equação de Hapke não muda, este efeito consiste em simplesmente somar a contribuição da radiação refletida de cada elemento de área sobre a superfície total do corpo.

Capítulo 3

Meteoritos HED e a amostra dos meteoritos estudados

1 Meteoritos HED

Acredita-se que o asteroide (4) Vesta é o corpo parental dos meteoritos HED. Vesta foi descoberto pelo médico alemão e astrônomo por vocação Heinrich Wilhelm Olbers em 29 de Março de 1807. Olbers implementou um pequeno observatório astronômico no segundo andar de sua casa em Bremem, Alemanha, onde colocou 2 telescópios de 5 polegadas, 2 telescópios para procurar cometas, 1 telescópio refrator e 1 relógio de pendulo ([Hockey et al., 2007](#)).

Os minerais que compõem a superfície de Vesta representam a fração menos densa dos produtos de um processo de diferenciação total, a partir de um corpo precursor com composição semelhante aos acondritos ordinários, e o fato destes minerais serem observados em Vesta sugere que este seja um corpo totalmente diferenciado. Vesta é o único asteroide que apresenta uma alta diferenciação, este têm um núcleo metálico, um manto ultramáfico e uma crosta basáltica (Figura 3.1). O tamanho de seu núcleo é de ~ 220 km, com uma densidade media de 3456 Kg/m^3 que é compatível com a densidade de meteoritos HED. Essas medidas são obtidas por meio seu campo gravitacional, massa, volume, e de materiais conhecidos ([Russell et al., 2012](#)).

Já que os minerais que constituem estes meteoritos cristalizaram a partir do magma, então, podem dar pistas sobre a composição original do material derretido e os processos que deram lugar à solidificação e que formou a crosta de Vesta. Então, meteoritos HED são rochas ígneas, formadas a partir da solidificação do material derretido. Também se observa entre os meteoritos HED, alguns meteoritos formados a partir de fragmentos de rochas ígneas, este tipo de rochas

se denomina rochas brechas.

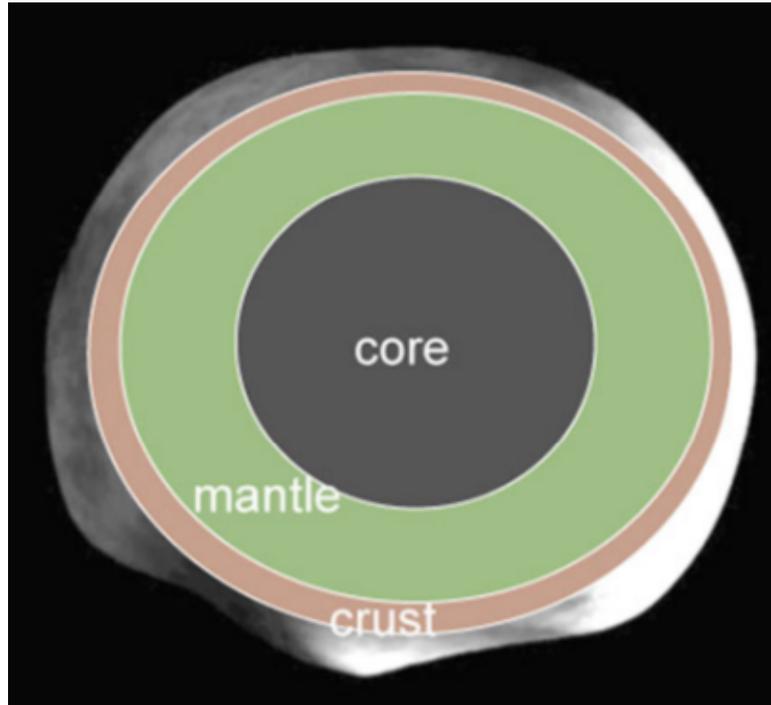


Figura 3.1: Esquema da estrutura interna de (4) Vesta. O núcleo está aproximadamente em escala, porém não a crosta. Figura extraída de [Zuber et al. \(2011\)](#)

1.1 Meteorito Eucrito

Acredita-se que os eucritos foram cristalizados na superfície ou quase na superfície do asteroide. Os principais minerais que conformam os meteoritos eucritos são piroxênio e plagioclase e, em menor quantidade, metal, troilita, cromita, ilmenita e sílica. Segundo a petrologia os eucritos podem ser divididos em rochas basálticas e rochas acumuladas. Os eucritos basálticos tem uma textura muito heterogênea, que devido a processos de recristalização começaram a perder sua textura de rocha ígnea original. Por exemplo, um tipo importante de textura em rochas basálticas é a textura ofítica; esta apresenta grandes cristais de piroxênio que tipicamente contêm numerosos cristais de plagioclase, onde estes cristais de piroxênio se formaram a taxas de resfriamento moderadas. Por exemplo, a Figura 3.2a mostra um eucrito com uma textura sub-ofítica contendo grãos de plagioclase e piroxênio, e a Figura 3.2b mostra o eucrito basáltico EET 90020 metamorfoseado com textura recristalizada. Cristais de minerais freqüentemente mostram zoneamento. Estes aparecem como bandas de distinta cor onde a ausência ou presença de estas bandas são úteis para conhecer sobre dos minerais e como estes crescem. Os minerais que apresentam zoneamento concêntrico se assemelham aos anéis das árvores, quer dizer, que quando o mineral esta crescendo e acontece algum cambio no meio, isto se reflete na espessura

das bandas tendo assim uma cor diferente que o resto das bandas. Esta cor distintiva do resto pode ser indicador de impurezas que foram adicionados ao mineral. Por exemplo, os piroxênios em alguns eucritos basálticos foram cristalizados apresentando zoneamento de pigeonita mas, por processo metamórfico térmico, o zoneamento original de Mg-Fe é destruído (Yamaguchi et al., 1996). Exsoluções em forma de lamelas de piroxênios se dão quando existem duas fases separadas em uma mesma solução sólida, isto acontece só em minerais cuja composição varia entre dois o mais composições puras de minerais. Então devido a fato de que o metamorfismo borra o zoneamento de Mg-Fe, os eucritos basálticos geralmente contem pigeonita de baixo conteúdo em Ca com finas lamelas de exsoluções de augita. No entanto, eucritos acumulados predominantemente não apresentam brechas e sua textura não é tão diversa como dos eucritos basálticos. Por exemplo, a Figura 3.2c apresenta o eucrito acumulado Moore Conty, onde se pode observar que está formado por grandes grãos. Mineralogicamente os eucritos acumulados são muito similares aos eucritos basálticos, onde os minerais principais são piroxênio e plagioclase.

1.2 Meteorito Diogenito

Os diogenitos são formados por grandes grãos de minerais e, segundo os estudos petrológicos, estes meteoritos foram criados a elevadas pressões e temperatura, determinando sua origem muito no profundo da crosta de seu asteroide progenitor. No entanto, estes meteoritos tem uma complexa historia térmica que dificulta saber com exatidão sua origem. Em composição, muitos diogenitos estão compostos principalmente por ortopiroxênio e em menor quantidade esta apresenta os minerais cromita e olivina. Para diogenitos que apresentam brechas se observa presença de minerais como plagioclase e diópsido, que foram depositados a partir de fragmentos de eucritos. No entanto, também se tem diogenitos que apresentam uma quantidade importante de olivina, com aproximadamente o 31% da amostra é olivina (Sack et al., 1991). A Figura 3.2d é a amostra GRA 98198, que corresponde a este tipo de diogenito chamado de "diogenito de olivina". Mas, esta alta concentração de olivina não se observa em toda a amostra: em outras regiões da amostra sua composição não é diferente dos outros diogenitos, em outras palavras, sua composição é principalmente de ortopiroxênio com pequena quantidade de olivina. Esta evidencia sugere que os chamados "diogenitos de olivina" não são minerais que sobraram de um processo anterior, sino que são rochas acumuladas semelhantes a outros diogenitos (Fowler et al., 1994). Mas, também se tem amostras de diogenitos que são muito complexas que podem ser resíduos de um derretimento parcial pertencentes ao manto de Vesta ou são fragmentos de

rochas acumuladas da crosta de Vesta ([Krawczynski et al., 2008](#)). A maioria dos diogenitos piroxênios com exceção de alguns que contem inusual composição mineralógica, seus elementos principais estão dentro de um intervalo estreito em composição mineralógica. Empregando o tetraedro dos piroxênios, os intervalos em composição são Wo_{1-3} , En_{71-77} e Fs_{22-24} . Em um sistema fechado quando se estão formando cristais a partir do magma, a composição global da mistura cristal-magma não muda. Então, para explicar esta variação da composição das amostras de diogenitos de piroxênios, o que se propõe é que se formaram em diferentes sistemas ou que o próprio sistema estava formado por regiões com diferentes temperaturas de equilíbrio ([Fowler et al., 1994](#)).

1.3 Meteorito Howardito

Os meteoritos howarditos estão constituídos de rochas preexistentes, compostos de fragmentos dos meteoritos eucritos e diogenitos. Acredita-se que os impactos que tiveram em Vesta há 4.1 a 3.5 Giga anos ([Bogard and Garrison, 2009](#)) foram os que criaram este tipo de meteorito. Este tipo de meteorito constitui uma boa representação da composição da crosta de Vesta. A Figura 3.2f mostra o meteorito howardito PCA 02019. Dentro das amostras de meteorito howardito se tem uma ampla gradação em composição e estrutura que vai desde meteoritos eucritos que não apresentam brechas, passando por meteoritos howarditos e diognitos brechados até diogenitos sem brechas. Isto é prova de que Vesta passou por uma grande escala de impacto, fragmentação e mistura.

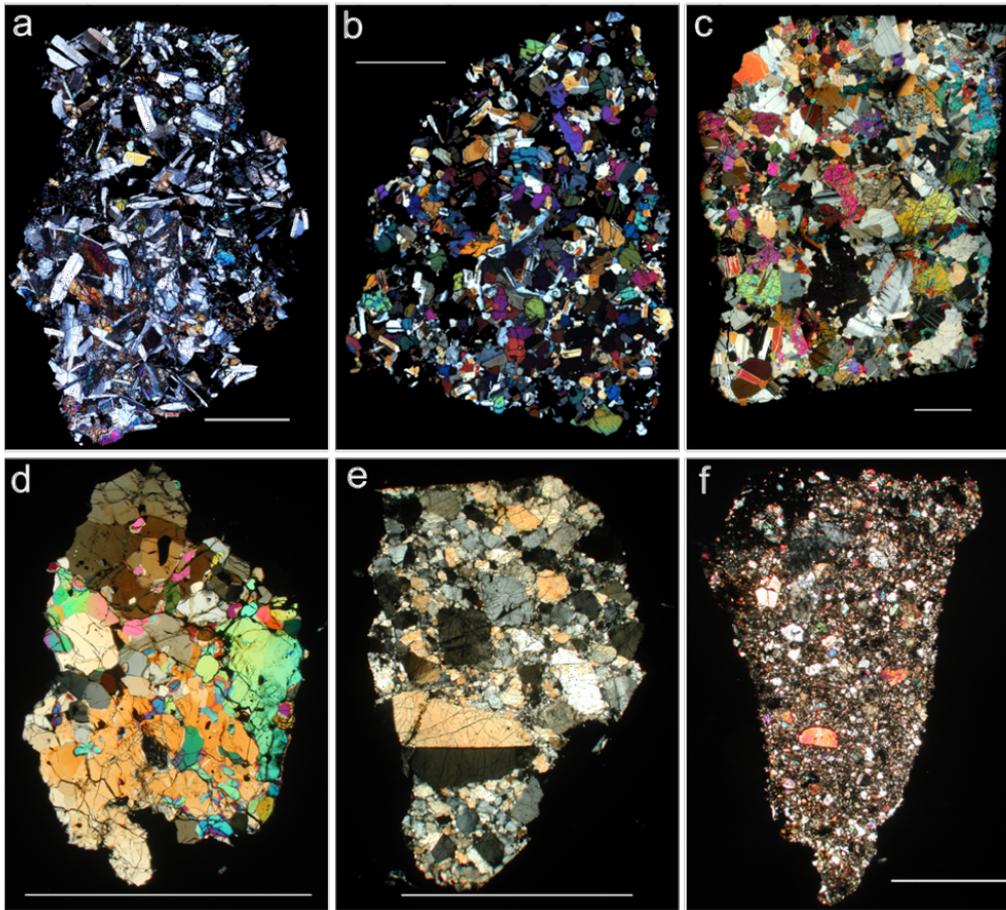


Figura 3.2: A Figura (a) á o meteorito eucrito basáltico QUE 97053, (b) o meteorito eucrito metamorfoseado EET 90020, (c) o meteorito eucrito acumulado Moore County, (d) o meteorito diogenito de olivina GRA 98108, (e) o meteorito diogenito brecheado QUE 99050 e, (f) o meteorito howardito PCA 02019. Figura extraída de [Zuber et al. \(2011\)](#).

2 Amostra dos meteoritos HED

Os espectros de meteoritos classe Eucritos, Diogenitos e Howarditos foram obtidos da base de dados pública RELAB (*Reflectance Experiment Laboratory*, em inglês). Esta base de dados é uma base muito heterogênea em tipos de amostras, tendo espectros de minerais, rochas, solos, meteoritos, metais como Ferro, Níquel, etc., espectros de materiais experimentais como aquelas irradiadas por laser e, espectros de materiais biológicos e orgânicos. O laboratório RELAB conta principalmente com dois espectrômetros: o espectrômetro de refletância bidirecional que opera no intervalo ultravioleta próximo, visível, ao infravermelho próximo de 0.32 a 2.55 μm , com uma resolução de 5.0 ou 10 nm, o segundo espectrômetro é o Nicolet 870 Nexus FTIR, que opera entre o infravermelho próximo e distante, no comprimento de onda nominal entre

1.0 – 50 μm .

As seguintes tabelas mostram os intervalos em diâmetro para meteoritos tipos Eucritos, Diogenitos e Howarditos obtidos da base de dados. A primeira coluna é o nome da amostra, a segunda seu código de identificação, a terceira é o intervalo em tamanho de grão em microns e, a quarta coluna é o meio empregado ao medir a distribuição de tamanhos das amostras, que pode ser em um meio *dry* ou *wet*. Cada conjunto da amostra foi medida sob as mesmas condições de geometria, intervalo de comprimento de onda, etc. Além disso, houve o cuidado em escolher conjuntos de amostras que foram preparadas pela mesma técnica empregada na medida da granulometria das distribuições de partículas. Por exemplo, a distribuição de tamanhos das partículas para a amostra eucrito Allan Hills foi determinada pelo mesmo método *dry-sieved*. Alguns conjuntos de amostras não especificam o método empregado e, variação na técnica de medir a granulometria da amostra para um mesmo meteorito e mesmo intervalo em diâmetro, se observa variação no seu espectro de refletância.

A seguir são apresentadas as tabelas dos meteoritos, com uma descrição sucinta de cada meteorito.

2.1 Amostra de meteoritos eucritos

Tabela 3.1: Amostra selecionada de meteoritos eucritos

Amostra	Amostra-id	Diâmetro (μm)	Método
ALHA76005	MB-TXH-066-A	0 - 25	dry-sieved
ALHA76005	MB-TXH-066-B	25 - 45	dry-sieved
ALHA76005	MB-TXH-066-C	45 - 75	dry-sieved
ALHA76005	MB-TXH-066-D	75 - 125	dry-sieved
ALHA76005	MB-TXH-066-E	125 - 250	dry-sieved
ALHA76005	MB-TXH-066-F	250 - 500	dry-sieved
Bouvante < 250	TB-RPB-028	0 - 250	
Bouvante bulk	TB-RPB-029	0 - 500	
EETA79005	TB-RPB-026	0 - 250	
EETA790B	TB-RPB-025	0 - 1000	
Juvinas	MB-TXH-070-A	0 - 25	dry-sieved
Juvinas	MB-TXH-070-B	25 - 45	dry-sieved
Juvinas	MB-TXH-070-C	45 - 75	dry-sieved
Juvinas	MB-TXH-070-D	75 - 125	dry-sieved
Juvinas	MB-TXH-070-E	125 - 250	dry-sieved
Millbillillie	MB-TXH-069-A	0 - 25	dry-sieved
Millbillillie	MB-TXH-069-B	25 - 45	dry-sieved
Millbillillie	MB-TXH-069-C	45 - 75	dry-sieved
Millbillillie	MB-TXH-069-D	75 - 125	dry-sieved
Padvarninkai impact melt	MB-TXH-096-A	0 - 25	
Padvarninkai impact melt	MB-TXH-096-B	25 - 45	
Padvarninkai	MB-TXH-096-C	0 - 25	
Padvarninkai	MB-TXH-096-D	25 - 45	
Stannern	MB-TXH-097-A	0 - 25	
Stannern	MB-TXH-097-B	25-45	
Yamato 74450	MB-TXH-071-A	0 - 25	dry-sieved
Yamato 74450	MB-TXH-071-B	25 - 45	dry-sieved
Yamato 74450	MB-TXH-071-C	45 - 75	dry-sieved
Yamato 74450	MB-TXH-071-D	75 - 125	dry-sieved

ALHA76005

Este meteorito está classificado como um meteorito acondrito abundante em Ca. A amostra apresenta 6 intervalos em tamanho de grão. A geometria de visão pela qual os espectros de

refletância foram obtidos são: ângulo de incidência 30° , de emissão de 0° , de fase de 30° e ângulo azimutal de 0° . A resolução espectral é de 5 nm, começando a medida em $0.3 \mu\text{m}$ e terminando em $2.6 \mu\text{m}$. Estes espectros foram obtidos a atmosfera e temperatura ambientes.

Bouvante

A amostra apresenta 2 distribuições de grão, a primeira distribuição tem como intervalo de tamanho de grão entre $0 - 250 \mu\text{m}$ e a segunda entre $0 - 500 \mu\text{m}$. Os ângulos de incidência, emissão, fase e azimutal, nos quais os espectros foram obtidos são: 30° , 0° e 30° , 0° respectivamente, com resolução espectral de 10 nm. Ambos espectros foram obtidos a temperatura e atmosfera ambiente. O meio em que foi realizada a granulometria não figura na base de dados.

EETA79005 e EETA790B

A amostra apresenta duas distribuições de grão, onde os limites de tamanho de cada distribuição são: $0 - 250$ e $0 - 1000$ ambas medidas em microns. Os ângulos de incidência, emissão, fase e azimute são: 30° , 0° , 30° e 0° . Os espectros foram obtidos a temperatura e atmosfera ambientes. O meio em que foi determinada a granulometria não consta na base de dados.

Juvinas

Este meteorito eucrito Juvinas apresenta 5 distribuições de tamanho de grão, onde os limites de diâmetro medidos em microns de cada distribuição são: $0 - 25$, $25 - 45$, $45 - 75$, $75 - 125$ e $125 - 250$. Segundo consta na base de dados a granulometria foi determinada em um meio seco. Os ângulos de incidência, emissão, fase e azimute são: 30° , 0° , 30° e 0° respectivamente, onde as medidas começam em $0.3 \mu\text{m}$ com uma resolução de 5 nm e terminam em $2.6 \mu\text{m}$. Os espectros foram obtidos a temperatura e a atmosfera ambientes.

Millbillillie

A amostra apresenta 4 distribuições de tamanho de partícula, onde os tamanhos limites medidos são: $0 - 25$, $25 - 45$, $45 - 75$ e $75 - 125$, em microns. Os ângulos de incidência, emissão, fase e azimute nas quais os espectros foram obtidos são: 30° , 0° , 30° e 0° respectivamente. A resolução espectral é de 5 nm começando em 0.3 até $2.6 \mu\text{m}$. Os espectros foram obtidos a temperatura e atmosfera ambientes.

Padvarninkai impact melt

A amostra apresenta duas distribuições de tamanho de grão, com tamanho limite para cada amostra de $0 - 25$ e $25 - 45 \mu\text{m}$. Os ângulos de incidência, emissão, fase e azimute são: 30° , 0° ,

30° e 0° respectivamente. O intervalo espectral vai desde 0.3 μm até 2.6 μm com uma resolução de 5 nm, onde as medidas foram realizadas a temperatura e atmosfera ambientes.

Padvarninkai

Este meteorito diferentemente do anterior, não foi formado por um evento de colisão. Esta amostra de meteorito apresenta duas distribuições de grão, onde os tamanhos limites de cada um é: 0 – 25 e 25 – 45 μm . Os ângulos de incidência, emissão, fase e azimute são: 30°, 0°, 30° e 0° respectivamente. O intervalo espectral vá desde 0.3 μm até 2.6 μm com uma resolução de 5 nm, onde as medidas foram realizadas a temperatura e atmosfera ambientes.

Starnern

A amostra de meteorito eucrito apresenta duas distribuições em tamanho de grão, estes são: 0 – 25 e 25 – 45 onde as medidas estão em microns. Os ângulos de incidência, emissão, fase e azimute são: 30°, 0°, 30° e 0° respectivamente. Os espectros foram obtidos a temperatura e atmosfera ambiente. A resolução espectral é de 5 nm partindo de 0.3 μm e terminando em 2.6 μm .

Yamato 74450

A amostra apresenta 4 distribuições de tamanho de grão, com tamanhos limites de 0 – 25, 25 – 45, 45 – 75 e 75 – 125 μm . A granulometria foi realizada em um meio seco. Os ângulos de incidência, emissão, fase e azimute são: 30°, 0°, 30° e 0° respectivamente. Estes espectros foram obtidos a temperatura e atmosfera ambientes. A resolução espectral é de 5 nm começando a medida em 0.3 μm e terminando em 2.6 μm .

2.2 Amostra de meteoritos diogenitos

Tabela 3.2: Amostra selecionada de meteoritos diogenitos

Nome	Amostra-id	Diâmetro (μm)	Método
EETA79002	MB-TXH-067-A	0 - 25	dry-sieved
EETA79002	MB-TXH-067-B	25 - 45	dry-sieved
EETA79002	MB-TXH-067-C	45 - 75	dry-sieved
EETA79002	MB-TXH-067-D	75 - 125	dry-sieved
EETA79002	MB-TXH-067-E	125 - 250	dry-sieved
EETA79002	MB-TXH-067-F	250 - 500	dry-sieved
Johnstown	MB-TXH-095-A	0 - 25	
Johnstown	MB-TXH-095-B	25 - 45	
Yamato 74013	MB-TXH-073-A	0 - 25	dry-sieved
Yamato 74013	MB-TXH-073-B	25 - 45	dry-sieved
Yamato 75032	MB-TXH-074-A	0 - 25	dry-sieved
Yamato 75032	MB-TXH-074-B	25 - 45	dry-sieved

EETA79002

Esta amostra de meteorito apresenta 6 distribuições de tamanho de grão, onde os intervalos limites de cada distribuição são: 0 – 25, 25 – 45, 45 – 75, 75 – 125, 125 – 250 e 250 – 500, medidas em microns. A granulometria das amostras foi medida em um meio seco. Os ângulos de incidência, emissão, fase e azimute à qual os espectros foram obtidos são: 30°, 0°, 30° e 0° respectivamente. As medidas dos espectros vão desde 0.3 até 2.6 μm com uma resolução de 5 nm, obtidos a temperatura e atmosfera ambientes.

Johnstown

A amostra tem duas distribuições em tamanho de grão, estes são: 0 – 25 e 25 – 45 μm . Os espectros das amostras foram obtidos com ângulos de incidência, emissão, fase e azimute de: 30°, 0°, 30° e 0° respectivamente e, tendo uma resolução de 5 nm começando em 0.3 μm e terminando em 2.6 μm . Os espectros foram obtidos a temperatura e atmosfera ambientes.

Yamato 74013

A amostra de meteorito apresenta dois distribuições de grão, com tamanhos limites de 0 – 25 e 25 – 45 μm . Segundo a base da dados, a granulometria foi medida em um meio seco. Os espectros foram obtidos com uma resolução de 5 nm, iniciando a medida em 0.3 μm

e terminando em $2.6 \mu\text{m}$, os ângulos de incidência, emissão, azimute e fase são: 30° , 0° , 0° e 30° respectivamente. Esta amostra de meteorito diogenito esta descrita como uma amostra recristalizada.

Yamato 75032

A amostra de meteorito apresenta duas distribuições de tamanho de grão, onde os limites em microns para a primeira amostra é de $0 - 25$ e para a segunda amostra é de $25 - 45$. Na base de dados consta que a medida da granulometria foi feita em meio seco. Com respeito à medida dos espectros, estes foram obtidos com uma resolução de 5 nm , iniciando em $0.3 \mu\text{m}$ e terminando a medida em $2.6 \mu\text{m}$, os ângulos de incidência, emissão, azimute e fase são: 30° , 0° , 0° e 30° respectivamente. Diferentemente da amostra anterior, este é um meteorito em que o ferro é abundante.

2.3 Amostra de meteoritos howarditos

Tabela 3.3: Amostra selecionada de meteoritos howarditos

Nome	Amostra-id	Diâmetro (μm)	Método
EET87503	MB-TXH-068-A	0 - 25	dry-sieved
EET87503	MB-TXH-068-B	25 - 45	dry-sieved
EET87503	MB-TXH-068-C	45 - 75	dry-sieved
EET87503	MB-TXH-068-D	75 - 125	dry-sieved
EET87503	MB-TXH-068-E	125 - 250	dry-sieved
EET87503	MB-TXH-068-F	250 - 500	dry-sieved
EET87503	MB-TXH-068-G	0 - 25	wet-sieved
EET87503	MB-TXH-068-H	0 - 125	wet-sieved
Kapoeta	MP-TXH-053-A	0 - 25	
Kapoeta	MP-TXH-053	0 - 1000	

EET87503

Este meteorito howardito apresenta 6 distribuições em tamanho de grão, o intervalo limite em microns são: $0 - 25$, $25 - 45$, $45 - 75$, $75 - 125$, $125 - 250$ e $250 - 500$. Segundo a base dos dados a granulometria foi medida em um meio seco. A geometria na qual foi obtidos os espectros são: ângulo de incidência 30° , ângulo de emissão 0° , azimute 0° e ângulo de fase 30° . As medidas dos espectros começam em 0.3μ e termina em $2.6 \mu\text{m}$, com uma resolução de 5

nm. As medidas foram obtida com a amostra girando (*spinning*), os espectros foram obtidas a temperatura de laboratório e atmosfera ambientes.

EET87503

A amostra de meteorito howardito é a mesma que a prévia, mas a granulometria foi feita em um meio úmido (*wet-sieved*). Esta amostra tem duas distribuições em tamanho de grão 0 – 25 e 0 – 125 μm . Os ângulos de incidência, emissão, azimute e fase são: 30°, 0°, 0° e 30° respectivamente. Os espectros foram obtidos a temperatura de laboratório e a atmosfera ambiente. As medidas dos espectros começam em 0.3 μm e terminam em 2.6 μm com uma resolução de 5 nm.

Kapoeta

A amostra apresenta duas distribuições em tamanho de grão 0 – 25 e 0 – 100 μm , nada base da dados do RELAB não apresenta o método empregado ao medir a granulometria. As medidas do espectro começam em 0.3 μm e terminam em 2.6 μm com uma resolução de 5 nm. Os ângulos de incidência, emissão, azimute e fase são: 30°, 0°, 0° e 30° respectivamente. Ambos os espectros foram tomados à temperatura de laboratório e a atmosfera ambientes.

Capítulo 4

Determinação de constantes óticas

No Capítulo 2 a refletância de um elemento de volume foi calculada, pelo modelo de [Hapke](#), usando diversos parâmetros que controlam as propriedades de meio junto com as constantes óticas que estão relacionadas à composição dos materiais. Portanto para se poder analisar como efeitos de forma podem influenciar os espectros de materiais que podem estar presentes nas superfícies de corpos no sistema solar, é preciso antes de tudo obter valores para as constantes óticas destes materiais.

1 Introdução

Primeiramente constantes óticas dependentes do comprimento de onda são quantidades fundamentais e macroscópicas da matéria; são fundamentais para o estudo da interação da onda eletromagnética com a matéria, como os fenômenos de reflexão e refração, e são macroscópicas devido à natureza da equação de Maxwell onde o elemento de volume considerado é muito maior que os elementos individuais que constituem a matéria.

A determinação das constantes óticas não é uma medida direta: primeiro se requer medidas como reflexão ou transmissão, para depois fazer inversão via modelos teóricos. Estes modelos, como por exemplo, a teoria de Mie ou as equações de Fresnel, requerem que os materiais sejam meios homogêneos em tamanho e forma, como por exemplo: cristais isolados, lajes, vidros, sólidos amorfos, etc. Cito de [Bohren and Huffman \(1998\)](#), Seção 2.9, sobre os métodos experimentais para determinar constantes óticas para meios homogêneos: (1) para amostras com elevada transparência, quando a parte imaginária do índice de refração é muito pequena, isto é $n_i \approx 0$, a lei de Snell pode ser aplicada para determinar a parte real do índice de refração

n , medindo o ângulo de desvio da luz refratada quando passa através de um prisma, (2) para amostras transparentes, se determina n com medidas de transmissão e refletância, com o ângulo de incidência quase normal, (3) para amostras opacas, se têm medidas de refletância para um intervalo de frequências, com o ângulo de incidência quase normal, e onde o deslocamento em fase da luz refletida é obtido pela relação de dispersão Kramens-Kroing, (4) se têm também as técnicas de elipsometrias, onde a razão das amplitudes e deslocamento em fase da luz refletida são medidas diretas e, (5) finalmente, medidas de refletância em vários estados de polarização a dois ângulos diferentes de incidência. Com estes métodos, as constantes óticas podem ser determinadas satisfatoriamente, mas para casos particulares e simples.

Infortunadamente materiais na superfície dos planetas, asteroides, etc. não são homogêneos e a camada superficial destes corpos é constituída por partículas irregulares em forma, tamanho e são uma mistura de composição mineralógica. Isto faz com que a determinação de constantes óticas a partir de medidas como espectroscopia de reflexão de superfícies naturais seja uma tarefa árdua. Cito a seguir alguns trabalhos sobre a determinação de constantes óticas.

Em [Pluchino et al. \(1980\)](#) os autores determinaram o índice de refração imaginário para uma esfera de carbono no intervalo da luz visível. Para isto os autores irradiaram luz polarizada sobre a amostra com comprimento de onda de $0.488 \mu\text{m}$ para vários ângulos de reflexão; empregando a teoria de Lorentz-Mie, determinaram o índice de refração n por inversão. Os autores concluíram que o índice de refração determinado por este método está em acordo com os valores da literatura para amostras de partículas de carbono.

Por outro lado, [Lucey \(1998\)](#) determinou o índice de refração imaginário para minerais de silicatos em função do conteúdo de Ferro. O autor empregou o modelo de refletância de [Hapke \(1981, 1993\)](#) para fazer a inversão dos espectros de refletância de minerais, para isto foram fixados antes o diâmetro, o índice real de refração n , e as constantes da função de fase. Como as amostras são distribuições de partículas, onde somente são conhecidos são os limites de tamanho de grão, o autor empregou a media de tamanho de grão para cada distribuição. Também, como a parte real do índice de refração não é fortemente dependente do comprimento de onda para o intervalo entre $0.4 - 2.5 \mu\text{m}$, o autor toma a média dos valores de n sobre os eixos cristalográficos em função da composição seguindo o trabalho de [Deer et al. \(1966\)](#). O autor usou como função de fase um polinômio de legendre com duas constantes, onde as constantes foram tomada do estudo de minerais que mostram maior espalhamento para altos ângulos de fase ([Mustard and Pieters, 1989](#)). Com respeito à inversão do espectro de refletância, a constante ótica imaginaria mostram uma dispersão do aproximadamente 10% com respeito

da media (Figura 4.1a). O autor reconheceu que a dispersão observada na constante ótica é devido ao inapropriado valor assumido do tamanho de grão. Então, o autor faz a inversão do espectro variando o valor do diâmetro de cada amostra para ter o melhor ajuste ao redor da constante ótica media. Este se pode observar na Figura 4.1b. Nesta última figura ainda as constantes óticas das amostras mostram dispersão em todo o comprimento de onda. Os valores de diâmetro médio de entrada foram 12, 22, 44, 60, 95 e 100 μm e os diâmetro otimizados foram de 13.2, 18.0, 46.2, 63.0, 94.0 e 95.0 μm .

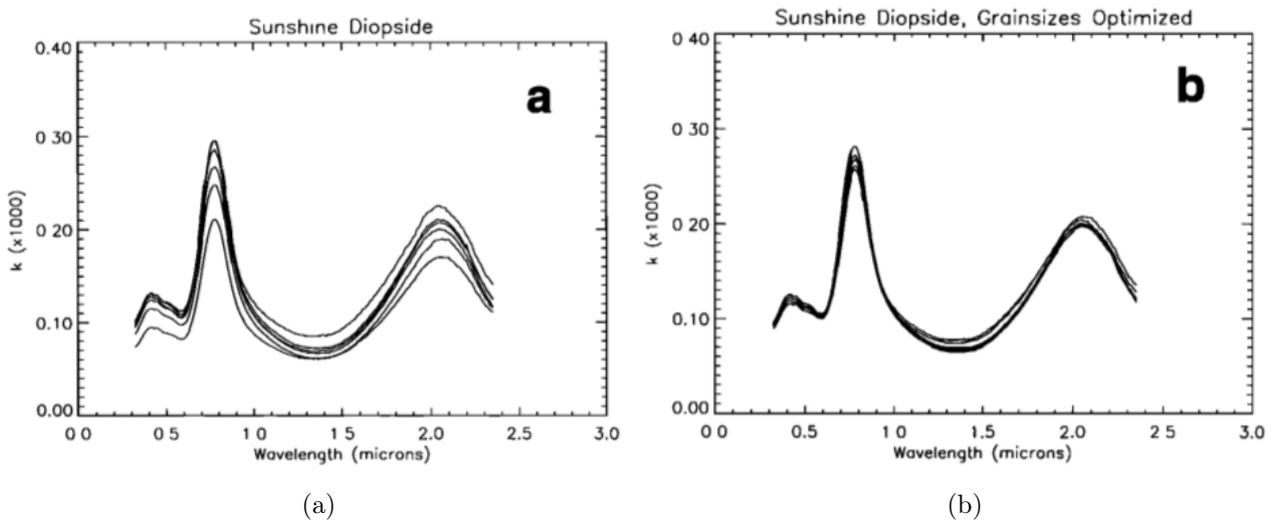
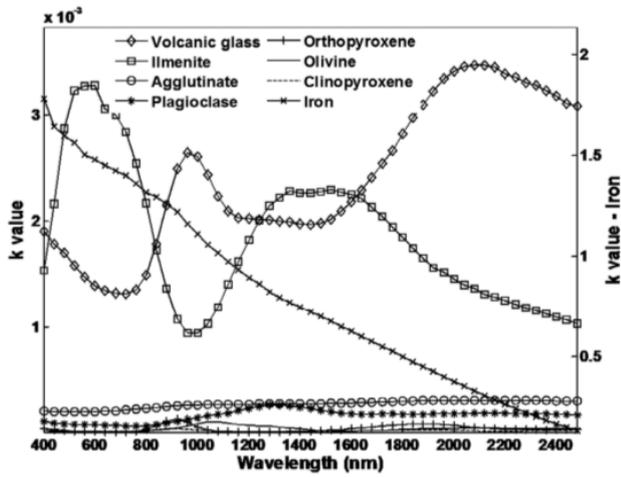
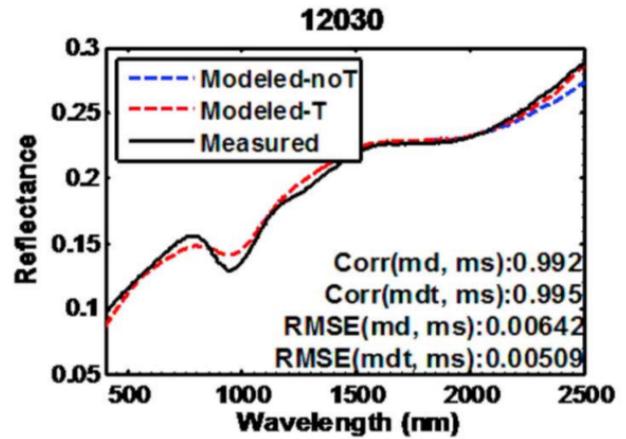


Figura 4.1: A figura (a) são as constantes óticas obtidas por inversão considerando o diâmetro médio, a figura (b) são as constantes óticas obtidas com o diâmetro otimizado. Figura extraída de [Lucey \(1998\)](#).

[Li and Li \(2011\)](#) empregaram o modelo de Hapke para quantificar os minerais da superfície da Lua, e o tamanho das partículas. Para isto, primeiro determinaram o índice de refração imaginário a partir da inversão dos espectros de refletância de minerais de olivina, piroxênio, e plagioclase, recompilados da base de dados de meteoritos RELAB e da base de dados de minerais USGS. Para a inversão dos espectros de refletância fixaram o diâmetro das partículas, o fator de preenchimento; para a parte real do índice de refração, foram adotados valores da literatura. As constantes da função da fase foram adotados de [Mustard and Pieters \(1989\)](#). As constantes óticas determinadas pelos autores são mostradas nas Figura 4.2a. Em geral, o espectro modelado é superior ao espectro das amostras no intervalo meio em comprimento de onda e o espectro modelado não ajusta bem quando o espectro da amostra apresenta uma banda de absorção, como se mostra na Figura 4.2b.



(a)



(b)

Figura 4.2: (a) constantes óticas obtidas por inversão para vários minerais, e (b) ajuste ao espectro observado utilizando uma constante ótica específica. Figura extraída de [Li and Li \(2011\)](#).

[Li and Milliken \(2015\)](#) derivaram a parte imaginária do índice de refração de minerais de olivina, piroxênio e plagioclase, como também amostras de meteoritos eucritos, diogenitos e Bamble piroxênio. Os espectros destas amostras foram obtidos da base de dados RELAB e, usaram o modelo de [Hapke \(1981\)](#) como o modelo de [Shkuratov and Starukhina \(1999\)](#) para obter o índice de refração imaginário. Como nos trabalhos anteriores, aqui os autores fixam o diâmetro, o fator de porosidade e a parte real do índice de refração para fazer a inversão do espectro pelos modelos e determinar assim o índice imaginário. Os autores comparam os índices de refração imaginário determinados por inversão para uma amostra de piroxênio, com o índice determinado para uma amostra de bronzita (F_{S14}) determinado por medidas de absorvância. Os autores concluem que, com respeito aos índices, (1) aqueles obtidos por ambos modelos diferem ligeiramente, são similares dentro do intervalo em comprimento de onda entre $0.4 - 1.5 \mu m$ mas, a diferença é maior a maiores comprimentos de onda (Figura 4.3). Isto pode ser devido ao fato de que os modelos diferem em suas funções de espalhamento, onde o modelo de Hapke tem uma dependência com a geometria de iluminação e, o modelo de Shkuratov independe dos ângulos de iluminação, (2) assumindo partículas irregulares, os índices determinados para dois piroxênios (F_{S10}, F_{S20}) caem no limite superior e inferior com respeito ao índice da bronzita, sugerindo que esta tendência nos índices é devido à diferença na química dos piroxênios. Em geral os autores obtêm bom ajustes para os espectros de eucrito e diogenitos empregando as constantes óticas determinadas (Figura 4.4), onde o modelo Hapke reproduz melhor os espectros observados que o modelo de Shkuratov.

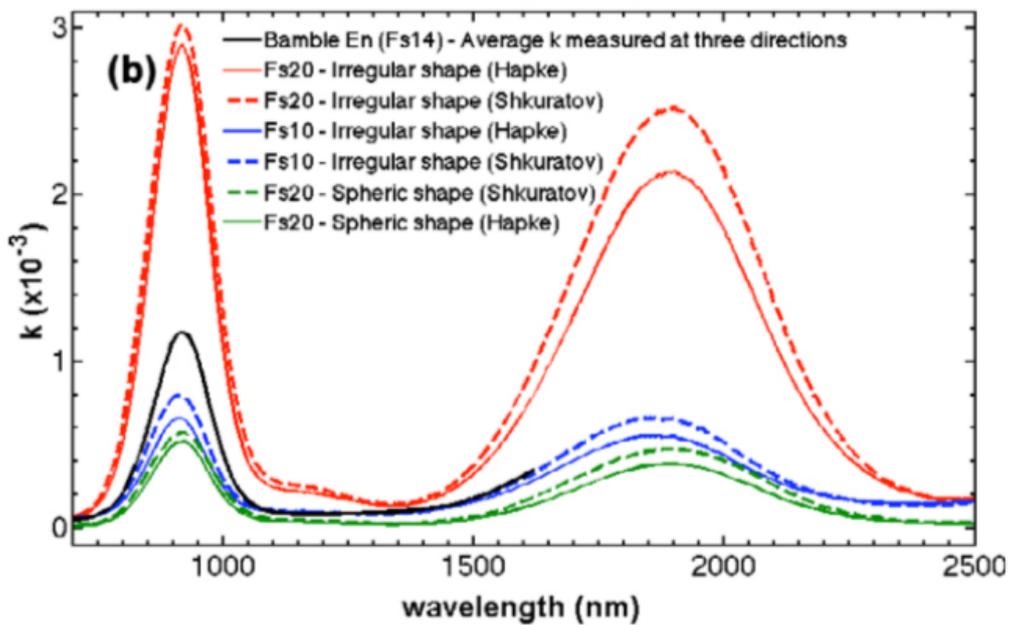


Figura 4.3: Constantes óticas empregando os modelos de Hapke e Shkuratov para partículas esféricas e irregulares. A curva de cor preto é a constante ótica da amostra Bamble obtida por absorvância. Figura extraída de [Li and Milliken \(2015\)](#).

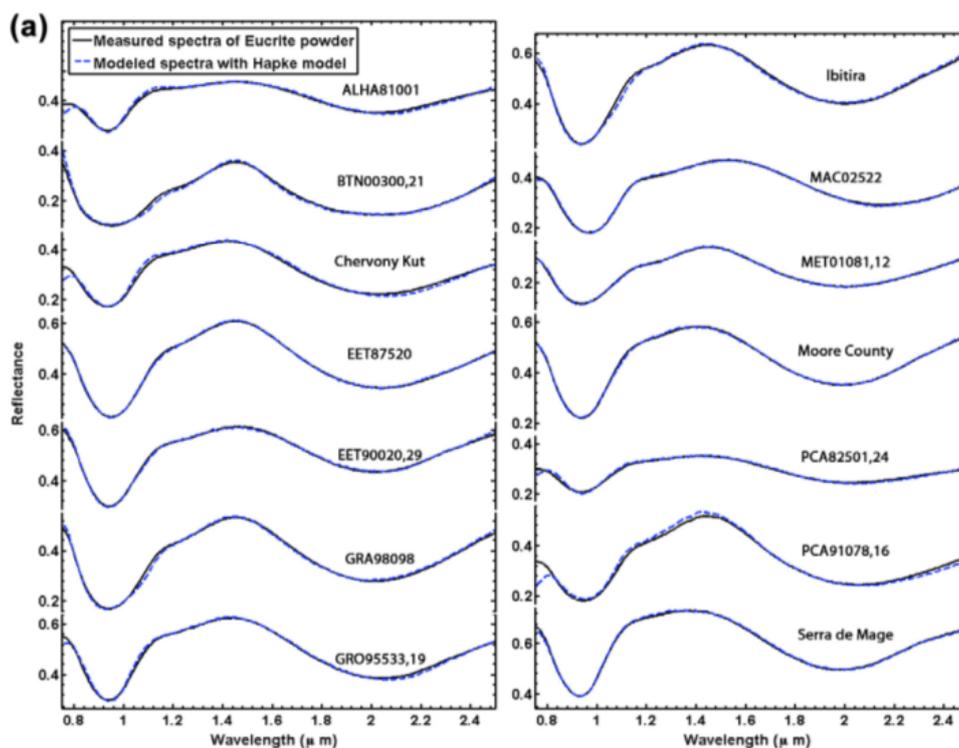


Figura 4.4: Espectros gerados a partir das constantes óticas determinadas empregando o modelo de Hapke para amostras de meteorito eucrito. A linha cheia é o espectro observado e a linha tracejada é o espectro modelado. Figura extraída de [Li and Milliken \(2015\)](#).

Para nosso propósito de estudar o efeito de forma sobre o espectro observado, determinamos

constantes óticas invertendo a equação de refletância do modelo de Hapke, a partir de espectros de refletância de meteoritos. No que segue primeramente fazemos um teste que determina a constante ótica imaginária fixando o valor da constante ótica real a 1.5, consideramos a porosidade do meio e logo somamos ao modelo a rugosidade macroscópica. Apos, consideramos uma implementação mais geral, no sentido que nos permita explorar o espaço de soluções de todas as variáveis do modelo e assim determinar soluções mais realistas. A diferença dos trabalhos comentados acima, aqui não fazemos suposições iniciais dos valores dos parâmetros para o cálculo das constantes óticas, além disso, as expressões usadas no modelo de Hapke são as mais acuradas.

2 Teste inicial

Como se mostra nas Tabelas 3.1, 3.2 e 3.3 de meteoritos eucritos, diogenitos e howarditas respectivamente, cada amostra apresenta várias distribuições de tamanho grão, onde para cada distribuição de grão se têm uma medida de refletância. No processo de inversão destes espectros para obter constantes óticas imaginaria $n_i(\lambda)$, empregando a equação de refletância, o diâmetro D e o fator de preenchimento K são considerados variáveis livres. Por exemplo, vamos considerar que temos alguma amostra de meteorito A que apresenta duas distribuições de tamanho de grão definidas como amostra A1 e amostra A2, onde os diâmetros limites de cada distribuição são: $D_{1,min} < D_1 < D_{1,max}$ e $D_{2,min} < D_2 < D_{2,max}$. Conhece-se que a porosidade ($p = 1 - \phi$) das amostras de meteoritos preparadas no laboratório varia entre 0.3 – 0.5 ou até 0.7, então vamos assumir que a porosidade para as duas amostras devem cair dentro de esses limites. Portanto, temos um conjunto de valores possíveis de D e ϕ que se podem empregar para inverter os espectros. A versão otimista é achar valores de $[D, \phi]_{A,B}$ para obter uma solução única ao inverter as equações de refletância.

Nesta parte se determinará a constante ótica imaginaria média e os valores otimizados de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média para cada amostra de meteorito.

Para o ajuste do modelo aos dados empregamos o método não linear de mínimos quadrados Levenberg-Marquardt (Levenberg, 1944; Marquardt, 1963). A expressão para ser minimizada tem a seguinte forma:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{[r_i - r_c(d, K, \lambda_i)]^2}{\sigma_i^2} \quad (4.1)$$

onde r_i são os dados, $r_c(d, K, \lambda_i)$ são os valores preditos pela equação de refletância de Hapke, onde os parâmetros a variar para minimizar χ^2 são o diâmetro d e o fator de porosidade K . Aqui o comprimento de onda λ é a variável independente. Neste primeiro teste não consideramos a rugosidade macroscópica, ademais consideramos em todo o processo que o índice de refração real é uma quantidade constante, isto se justifica mais adiante. Por último, fixamos $\sigma = 1$ já que a maioria dos dados não apresenta medida de incerteza.

Para o processo de inversão empregamos a rotina `brentq` da livreria SciPy (Jones, Oliphant, Peterson, et al., 2001). SciPy é uma coleção de algoritmos matemáticos para computação científica escrita em linguagem Python. Então, para determinar a raiz de função f , é preciso colocar antes o intervalo $[a, b]$ onde um quer achar a solução. Também é necessário que a função f tenha signos opostos nos limites $f(a)$ e $f(b)$. Para nosso problema os limites escolhidos são $a = 10^{-6}$ e $b = 10^{-1}$. Estes limites são dados por teste e erro, até determinar solução para todos os valores de diâmetros das amostras de meteoritos.

A seguir se explica o método de inversão empregado para obter a constante ótica imaginária.

2.1 Inversão da equação de refletância de Hapke considerando o fator de porosidade K

Para o processo de inversão empregamos o fator de refletância r_c , que é a quantidade que é efetivamente medido pelo instrumento do RELAB. A equação para r_c é a seguinte:

$$r_c = K \frac{w}{4} \frac{1}{\mu_o + \mu_e} [p(g) + H(\mu_o, w, K)H(\mu_e, w, K) - 1] \quad (4.2)$$

onde, K é o fator de porosidade, w é o albedo médio de espalhamento simples, μ_o e μ_e são os co-senos dos ângulos de incidência e emissão respectivamente, $p(g)$ é a função de fase e, H é a função Ambartsumian-Chandrasekhar.

As expressões explícitas empregadas para inverter a equação de refletância são:

O albedo de espalhamento simples, definido segundo a Equação 2.26, que para uma partícula esférica se tem que $S_e = S_i$, então:

$$\omega = S_e + \frac{(1 - S_e)^2}{1 - S_e \Theta} \Theta \quad (4.3)$$

Uma aproximação analítica para S_e é empregado (Hapke, 2012b):

$$S_e = 0.0587 + 0.8543R_o + 0.0870R_o^2 \quad (4.4)$$

onde R_o é o coeficiente de reflexão a incidência normal, definido por:

$$R_o = \frac{(n_r - 1)^2 + n_i^2}{(n_r + 1)^2 + n_i^2} \quad (4.5)$$

para o coeficiente de transmissão interna Θ empregamos o modelo exponencial, onde o valor exato é dado pela Equação 2.16.

$$\Theta = \frac{2n_r^2}{(\alpha D)^2} \{e^{-\alpha D(1-1/n_r^2)^{1/2}} [1 + \alpha D(1-1/n_r^2)^{1/2}] - e^{-\alpha D} [1 + \alpha D]\} \quad (4.6)$$

a função de fase utilizada é a função de fase double Henyey-Greeinstein (Equação 2.29):

$$p(g) = \frac{1+c}{2} \frac{1-b^2}{(1-2b \cos g + b^2)^{3/2}} + \frac{1-c}{2} \frac{1-b^2}{(1+2b \cos g + b^2)^{3/2}} \quad (4.7)$$

onde a constantes c é função das propriedades ótica do meio e do tamanho da partícula.

$$c = \frac{\Delta Q_s}{Q_s} \quad (4.8)$$

onde b e c estão relacionados por (Hapke, 2012a):

$$b = \left[\frac{1}{17.4} \ln \frac{3.29}{0.908 + c} \right]^{1/2} \quad (4.9)$$

empregamos uma aproximação analítica da função Ambartsumian-Chandrasekhar, que toma em conta o efeito de porosidade, (Hapke, 2008).

$$H(x) = \frac{1 + 2x/K}{1 + 2\gamma x/K} \quad (4.10)$$

aqui x pode ser o ângulo de incidência o de emissão.

$$\gamma = \sqrt{1-w}$$

onde K é função do fator de preenchimento ϕ , que segundo Hapke (2008) está relacionado pela seguinte equação:

$$K = -\ln(1 - 1.209\phi^{2/3})/1.209\phi^{2/3} \quad (4.11)$$

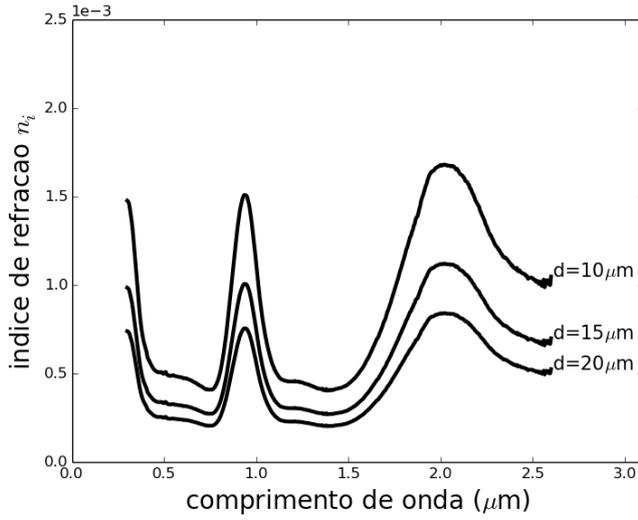
o fator de preenchimento é função da porosidade (p) do meio definida por $\phi = 1 - p$. Segundo (Hapke, 2008), o fator de preenchimento ϕ para amostras de laboratório varia entre $0.1 \leq \phi \leq 0.5$ e, segundo Helfenstein and Shepard (2011), os fatores de preenchimento de regolitos e de muitos materiais terrestres estão dentro dos limites de $0.3 \leq \phi \leq 0.7$. Além disso, a expressão no logaritmo dada por: $(1 - 1.209\phi^{2/3})$ tem que ser positiva, portanto, o valor máximo que pode ter o fator de preenchimento será menor que 0.75. Consideramos como valor superior 0.7 e o valor de 0.1 como limite inferior. Também consideramos o valor fixo de $n_r = 1.5$ para o índice de refração real, que vem ser o valor médio para minerais de silicatos no intervalo do visível.

Dependência da inversão para os valores de D , ϕ e n_r

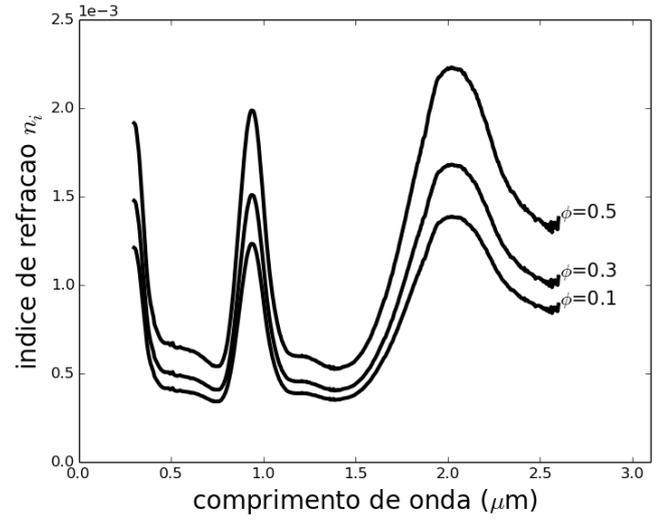
Antes de começar com o método para obter a parte imaginária da constante ótica dependente do comprimento de onda $n_i(\lambda)$, estudara com detalhe a dependência desta com cada variável. Para isto tomamos o primeiro espectro de refletância do meteorito eucrito ALHA76005,85, onde seus limites em tamanho de grão vão de $0 < D < 25\mu\text{m}$. Então, fazemos a inversão do espectro de refletância para três valores de tamanho de grão, estes são: 10, 15 e 20 μm , mantendo fixo a parte real da constante ótica $n_r = 1.5$ e o fator de preenchimento $\phi = 0.3$. Lembrar que todos mantêm a mesma geometria de visada $i = 30^\circ$, $e = 0^\circ$ e $g = 30^\circ$. Para a inversão do espectro de refletância vamos empregar a equação 4.2.

A Figura 4.5(a) mostra as três curvas obtidas pelo processo de inversão para os três tamanhos de grão, pode-se observar que, quando se incrementa o tamanho do grão, os contrastes dos máximos diminuem e também se vê diminuída a curva como um todo. Se definimos a inclinação entre os pontos máximos de cada curva, então com respeito à curva para $d=10\mu\text{m}$, a curva para $d=15\mu\text{m}$ tem uma inclinação de $\sim 66\%$, e a curva para $d=20\mu\text{m}$ tem $\sim 50\%$, portanto, a inclinação das curvas diminui quando se incrementa o tamanho do grão. Por outro lado, não se têm variação da posição dos máximos com respeito ao comprimento de onda, a posição do primeiro máximo para as três é de $0.935\mu\text{m}$ e de $2.02\mu\text{m}$ para o segundo máximo. Segundo, vamos a manter constante o tamanho de grão em $10\mu\text{m}$ e obter constantes óticas para três valores de fator de preenchimento $\phi = 0.1, 0.3, 0.5$. A Figura 4.5b mostra a dependência da constante ótica $n_i(\lambda)$ para três valores de ϕ , é fácil observar que, quando aumenta o valor de ϕ , também se incrementa a constante ótica como um todo. Não se observa variação dos máximos

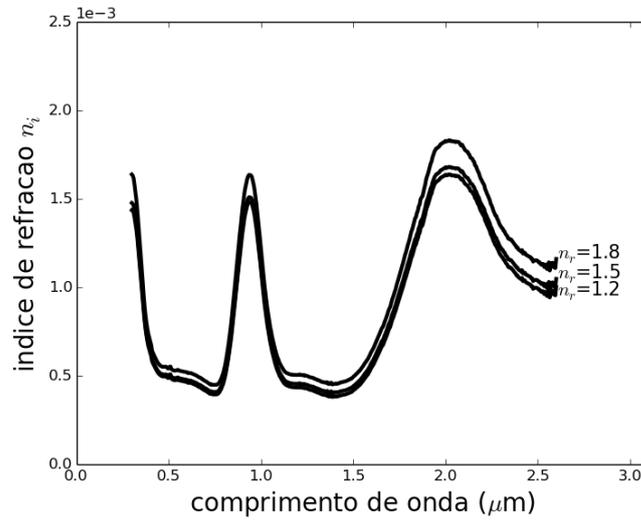
com respeito ao comprimento de onda, as posições dos máximos para as três constantes óticas são $0.935 \mu\text{m}$ e $2.02 \mu\text{m}$. A inclinação com respeito à da curva com $\phi = 0.5$, para $\phi = 0.1$ é de $\sim 63\%$ e para $\phi = 0.3$ é de $\sim 70\%$, portanto, a inclinação da curva se incrementa quando se incrementa o valor de ϕ . A Figura 4.5c mostra três constantes óticas $n_i(\lambda)$ para três valores de índice de refração real $n_r = [1.2, 1.5, 1.8]$, mantendo constante o tamanho do grão e o fator de preenchimento, estes são $10 \mu\text{m}$ e 0.3 respectivamente. Estes três constantes óticas mostram uma menor dispersão que as constantes óticas das Figuras 4.5a e b. As variâncias de cada grupo de constantes óticas normalizadas a uma só constante ótica gerada com valores de diâmetro, índice de refração real e fator de preenchimento de $10 \mu\text{m}$, 1.5 e 0.3 , respectivamente, são: (a) 3.87 , (b) 3.67 e (c) 0.27 , aqui o último grupo de constantes óticas dependente de n_r mostra a menor variância. Devido à menor dependência da constante ótica $n_i(\lambda)$ com n_r , justifica por ora tomar um valor constante para n_r ao momento de inverter os espectros de refletância.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.5: (a) Constantes óticas $n_i(\lambda)$ para três valor de tamanho de grão, $10 \mu\text{m}$, $15 \mu\text{m}$ e $20 \mu\text{m}$, mantendo constante o fator de preenchimento a $\phi = 0.3$ e a parte real da constante ótica a $n_r = 1.5$, (b) constantes óticas para três valores de fator de preenchimento $\phi = [0.1, 0.3, 0.5]$, mantendo constante o tamanho de grão em $10 \mu\text{m}$, (c) constantes óticas para três valores do índice de refração real $n_r = [1.2, 1.5, 1.8]$.

Inversão do meteorito eucrito Allan Hills ALHA76005

Como um exemplo, vamos considerar a primeira amostra do meteorito eucrito ALHA76005. Esta amostra foi preparada em 6 intervalos em tamanho de grão, estes são: $0 - 25$, $25 - 45$, $45 - 75$, $75 - 125$, $125 - 250$ e $250 - 500$, estes tamanhos estão dados em microns. Os parâmetros no

modelo de Hapke escolhidos para a inversão são os citados acima onde, no modelo, as partículas são consideradas esféricas e transparentes; isto quer dizer que os coeficientes de reflexão externa e interno são iguais $S_e = S_i$ e que não se considera espalhadores internos. A Figura 4.6a mostra os espectros de refletância para os 6 intervalos em tamanho de grão (Tabela 3.1). A Figura 4.6b mostra as constantes óticas imaginarias n_i obtidas por inversão dos espectros de refletância, considerando o diâmetro médio de cada intervalo; estes são, para o espectro A: 12.5, B: 35, C: 60, D: 100, E: 187.5 e F: 375 μm e fixando a parte real do índice de refração a $n_r=1.5$ e, o valor médio do fator de preenchimento. Como pode ser observado, as constantes óticas imaginarias n_i mostram um grande espalhamento.

Começamos pelo caminho mais simples que é o calcular a média destas constantes óticas imaginária. Então, para determinar se a constante ótica imaginária média é uma boa representação para os espectros de refletância dentro dos limites de diâmetro e fator de preenchimento, reconstruímos cada espectro de refletância a partir desta constante ótica média, mas, minimizando em diâmetro D e fator de porosidade K ao redor de cada espectro. Para o processo de minimização se limita o diâmetro aos valores inicial e final de cada distribuição de tamanho de grão, onde o fator de porosidade K é limitado aos valores inicial e final do fator de preenchimento $0.1 \leq \phi \leq 0.7$ (ver Equação 4.11).

Os valores iniciais de diâmetro e fator de preenchimento que têm que ser dados no processo de minimização são determinados fixando primeiro uma variável, por exemplo, fixamos o fator de preenchimento a seu valor médio de $\phi = 0.4$, logo passamos a variar o diâmetro dentro do intervalo de tamanho de grão para cada amostra, com um passo relativamente pequeno, em seguida se escolhe o valor de diâmetro que produz o mínimo quadrado médio residual no ajuste. Depois fixamos o valor de diâmetro determinado e, passamos a variar o fator de preenchimento. Quando se tem mais de um valor que obedeça esta condição, neste caso passamos simplesmente a tomar a média. Uma vez determinado os dois valores iniciais se voltam a fazer a minimização variando tanto em diâmetro como em fator de porosidade. O passo para determinar o diâmetro inicial é de $s=1 \mu\text{m}$ e, para o fator de preenchimento é de $s = 0.01$, estes passos se mantêm fixos para toda as amostras.

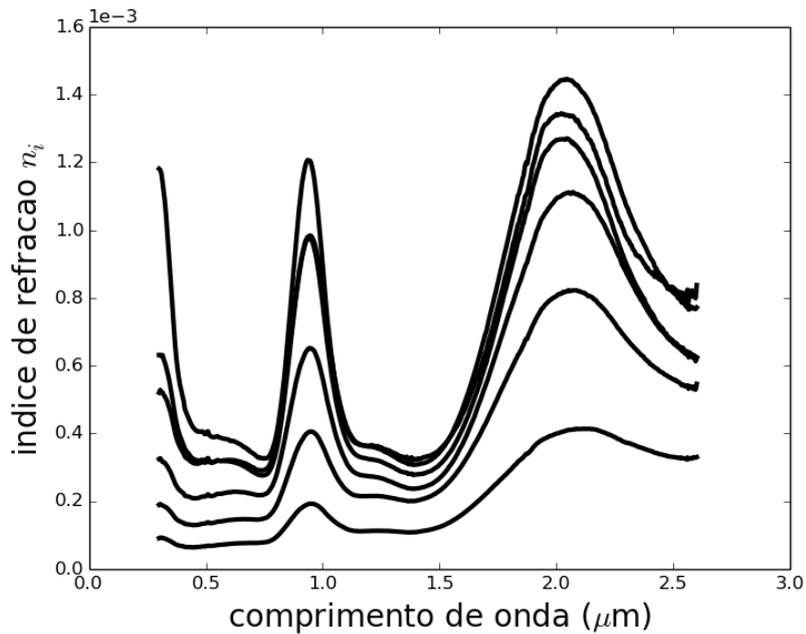
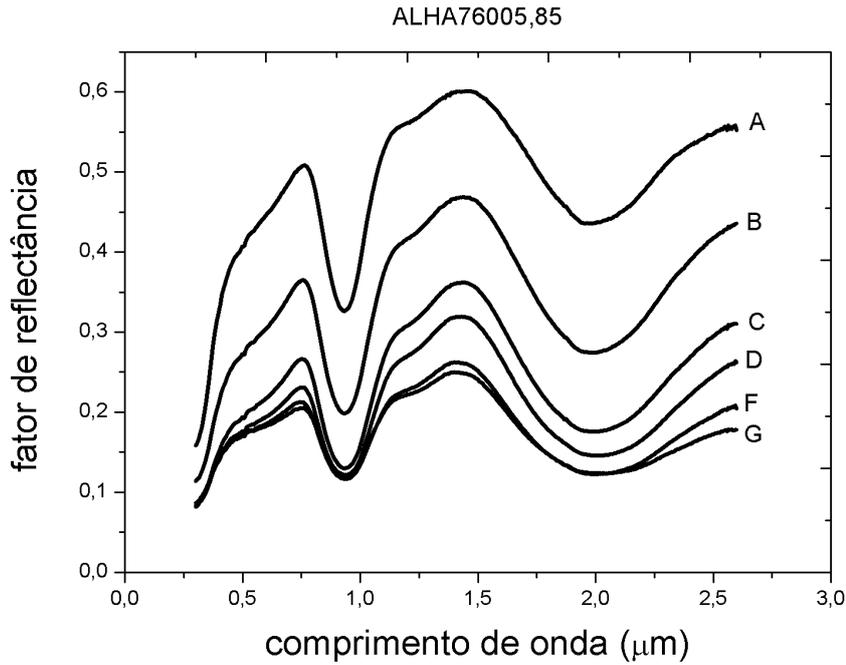


Figura 4.6: (a) Espectros refletância para o meteorito eucrito ALHA76005,85. O espectro A corresponde ao intervalo de grão de $0 - 25 \mu\text{m}$; o espectro B: $25 - 45 \mu\text{m}$; o espectro C: $45 - 75 \mu\text{m}$; o espectro D: $75 - 125 \mu\text{m}$; espectro D: $125 - 250 \mu\text{m}$ e, o espectro F: $250 - 500 \mu\text{m}$. Todos obtidos sob a mesma geometria de visada, $i=30^\circ$, $e=0^\circ$ e $g=30^\circ$, (b) constantes óticas $n_i(\lambda)$ obtido por inversão da equação de Hapke considerando diâmetro médio para cada intervalo de tamanho de grão, $12.5, 35.0, 60.0, 100.0, 187.5, 375.0 \mu\text{m}$, com um valor médio para o fator de preenchimento de 0.4 , com índice de refração real fixo $n_r = 1.5$, onde os ângulos de incidência, emissão e fase são $30^\circ, 0^\circ$ e 30° respectivamente.

Resultados

A Tabela 4.1 mostra os valores otimizados de diâmetro e fator de porosidade obtidos a ajustar a equação de refletância 4.2 a cada espectro de refletância da amostra empregando a constante ótica imaginária média \bar{n}_i . As primeiras duas colunas são os valores iniciais de diâmetro e fator de preenchimento, as seguintes duas colunas são o diâmetro e fator de preenchimento otimizados, cada valor têm uma medida de erro padrão que é dada pela rotina de minimização.

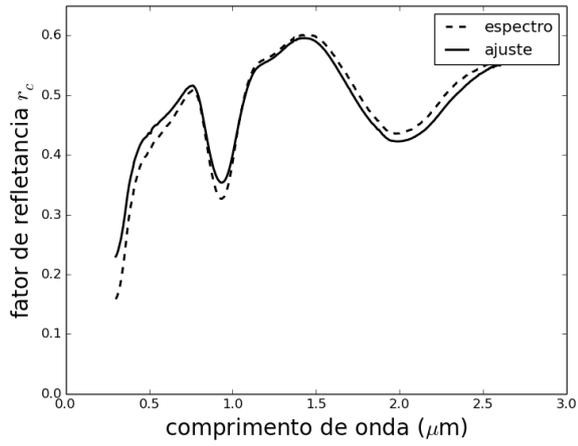
Como pode ser observado na Figura 4.7, que mostra os ajustes para os espectros obtidos com diferentes intervalo em tamanho de grão, a refletância tem um decréscimo quando se incrementa o tamanho das partículas. Aqui a linha cheia é o espectro ajustado e a linha tracejada é o espectro das amostras. O primeiro espectro gerado a partir da constante ótica imaginária média n_i se mostra na Figura 4.7a, o melhor ajuste em diâmetro e fator de porosidade são $23.78 \mu\text{m}$ e 2.114 respectivamente. O ajuste só é bom nas asas da primeira banda de absorção mas, não consegui alcançar a profundidade de esta. Antes da primeira banda de absorção o espectro ajustado mostra maior refletância e depois mostra um decréscimo na sua refletância, isto com respeito ao espectro da amostra. Para a Figura 4.7b se observa um melhor ajuste que a figura anterior. O ajuste ainda não é bom para a primeira banda de absorção, mas, se pode observar um melhor ajuste na segunda banda entanto, entre 2.0 a $2.5 \mu\text{m}$ aproximadamente o ajuste esta por debaixo do espectro. O diâmetro e fator de preenchimento obtidos são $45.00 \mu\text{m}$ e 1.375 respectivamente. Para a Figura 4.7c o diâmetro e fator de preenchimento para o melhor ajuste são $67.64 \mu\text{m}$ e 1.361 respectivamente. Aqui se tem um bom ajuste para a primeira e segunda banda de absorção, mas ainda na parte inferior da segunda banda o ajuste não é perfeito. Para a Figura 4.7d se observa o contrario, agora se tem um melhor ajuste para a segunda banda de absorção e a primeira banda o espectro tem menor refletância que o espectro observado. Para as Figuras 4.7e-f só se têm um ajuste parcial na segunda banda de absorção, na primeira banda esta longe de ter um bom ajuste. A Figura 4.8 representam os resíduos dos ajustes, isto é uma forma de observar o comportamento do ajuste. Então, as Figuras 4.8a, 4.8b e 4.8c mostram um ajuste aceitável, mas não assim as Figuras 4.8d, 4.8e e 4.8f onde se observa que seus resíduos são maiores que a unidade.

Segundo a Tabela 4.1 é observado que, quando aumenta o tamanho das partículas o fator de preenchimento também aumenta, exceto para a amostra E, isto é devido a que os valores obtidos de diâmetro e fator de porosidade não são os corretos para ter um bom ajuste a espectro de refletância. A falta de ter um bom ajuste para tamanhos maiores de grão pode ser devido

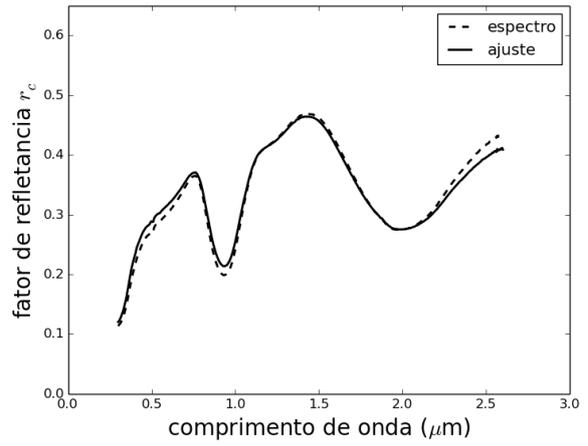
à rugosidade das amostras. Então, o próximo é levar em conta a rugosidade na equação de refletância de Hapke.

Tabela 4.1: Diâmetro D e fator de preenchimento ϕ otimizados. As primeiras três colunas são os valores iniciais de entrada para a minimização (D , ϕ , K) e, as seguintes duas colunas são os valores obtidos.

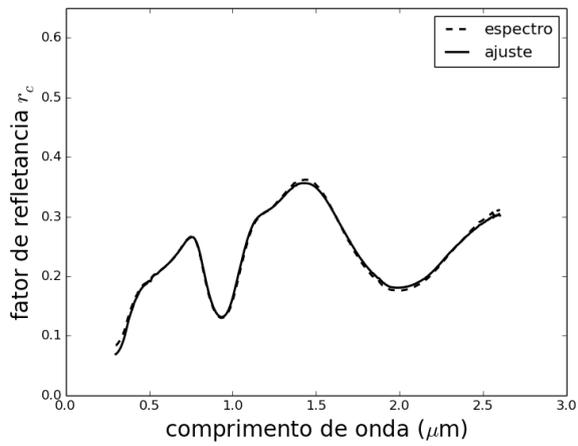
	Valores iniciais			Valores otimizados	
	D (μm)	ϕ (%)	K	D (μm)	K
A	19.82	40.94	1.648	23.78 ± 0.01	2.114 ± 0.010
B	40.82	47.17	1.800	45.00 ± 0.07	1.375 ± 0.005
C	56.37	50.89	1.911	67.64 ± 1.53	1.361 ± 0.000
D	98.28	44.32	1.726	117.94 ± 5.44	1.886 ± 0.214
E	178.37	40.31	1.634	214.04 ± 4.83	2.625 ± 0.447
F	365.19	53.23	1.990	292.15 ± 0.01	3.211 ± 0.126



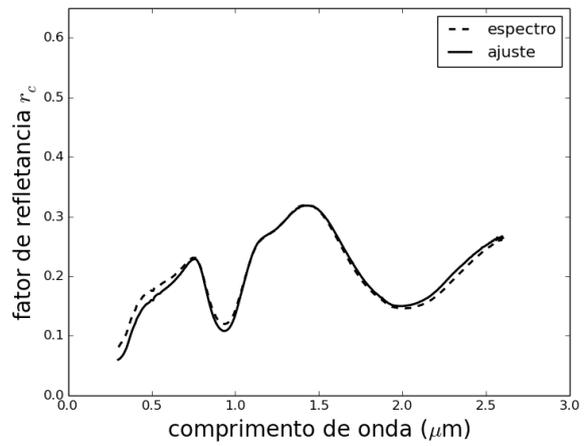
(a)



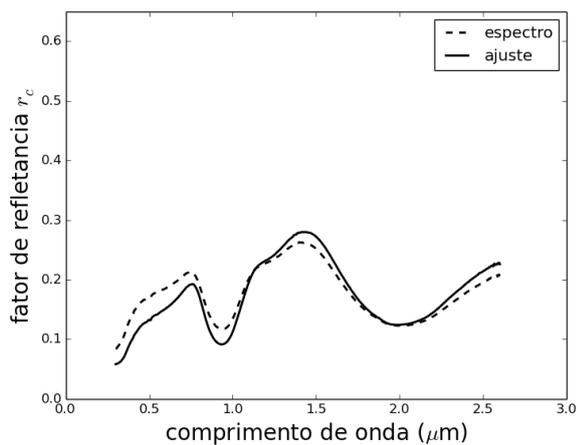
(b)



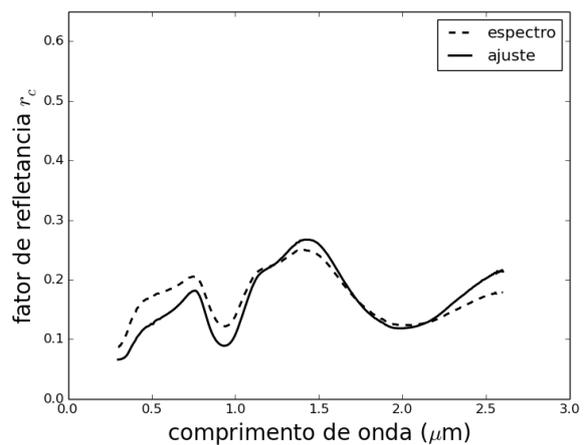
(c)



(d)

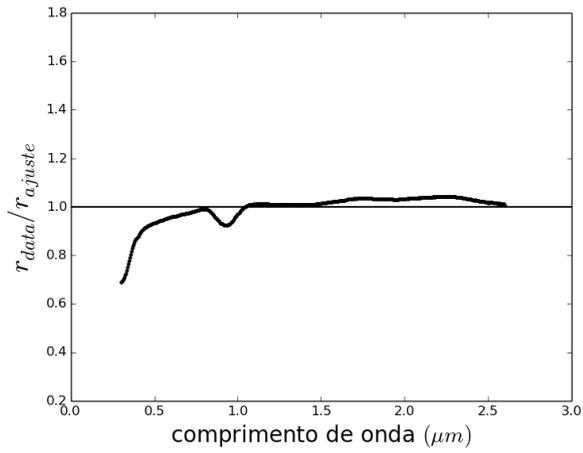


(e)

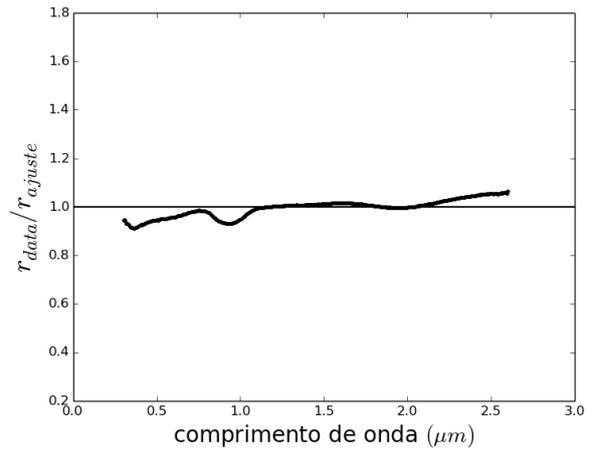


(f)

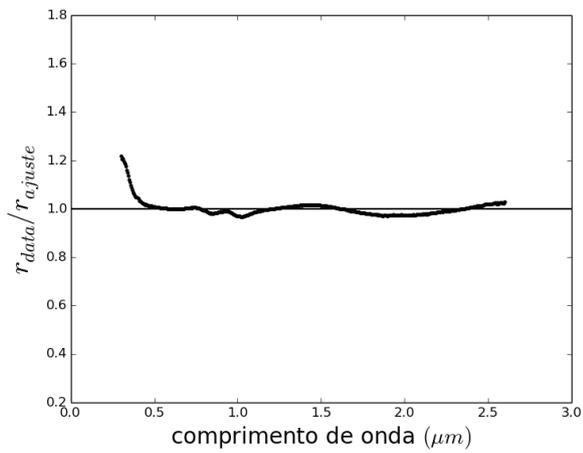
Figura 4.7: A linha tracejada representam os dados do espectros de refletância e a linha cheia é o espectro de refletância ajustado em diâmetro D e fator de porosidade K , com índice de refração real $n_r = 1.5$ e, ângulos de incidência, emissão e fase de 30° , 0° , 30° respectivamente.



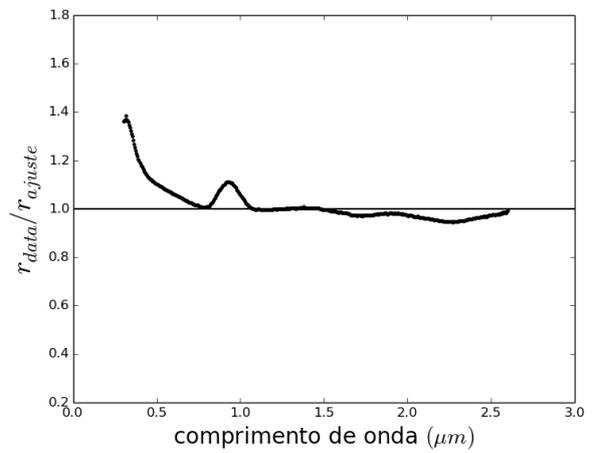
(a)



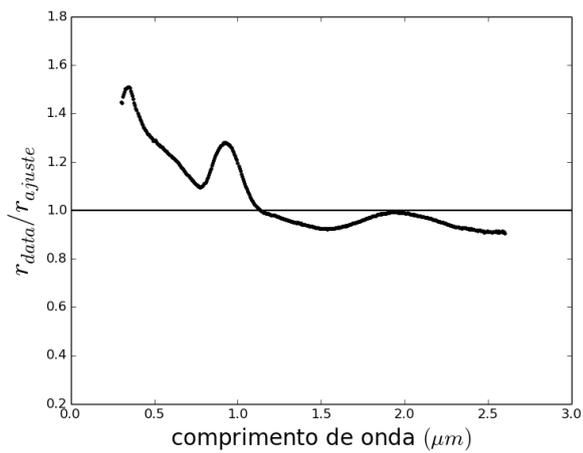
(b)



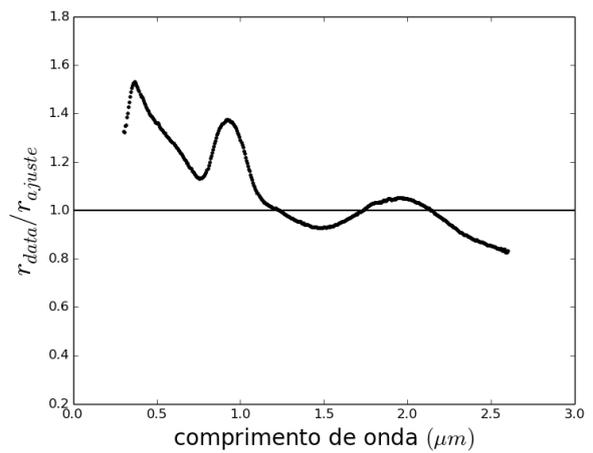
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 4.8: Cada figura é o espectro de refletância dividido entre o melhor ajuste em D e K , com índice de refração real $n_r = 1.5$ e ângulos de incidência, emissão e fase de 30° , 0° , 30° respectivamente. O desvio médio para cada resíduo com respeito à unidade em percentagem são: (a) 4.27, (b) 2.84, (c) 1.80, (d) 4.27, (e) 9.83 e (f) 11.82.

2.2 Inversão da equação de refletância considerando o fator de porosidade K e o efeito de rugosidade macroscópica $\bar{\theta}$.

Hapke (1993) modela a rugosidade macroscópica considerando facetas lisas e inclinadas em uma variedade de ângulos. Para caracterizar a rugosidade da superfície considera o parâmetro $\bar{\theta}$ chamado de ângulo de inclinação média (ver a Seção 3.1).

Então a equação reflectância bidirecional de Hapke considerando o efeito de rugosidade da superfície caracterizado pelo ângulo de inclinação media $\bar{\theta}$ é:

$$r_R(i, e, g) = K \frac{\varpi}{4\pi} \frac{\mu_{0e}}{\mu_{0e} + \mu_e} [p(g) + H(\mu_{0e}, K)H(\mu_e, K) - 1] S(i, e, \psi) \quad (4.12)$$

A seguir vamos observar qual é o comportamento da inversão da equação de Hapke para três valores diferentes de $\bar{\theta}$. Vamos tomar o primeiro espectro de refletância e fixamos o diâmetro, o fator de preenchimento aos valores médios de $12.5 \mu\text{m}$ e 0.3 respectivamente e $n_r = 1.5$. A Figura 4.9 mostra que quando aumenta o ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$, também aumenta a constante ótica n_i como um todo.

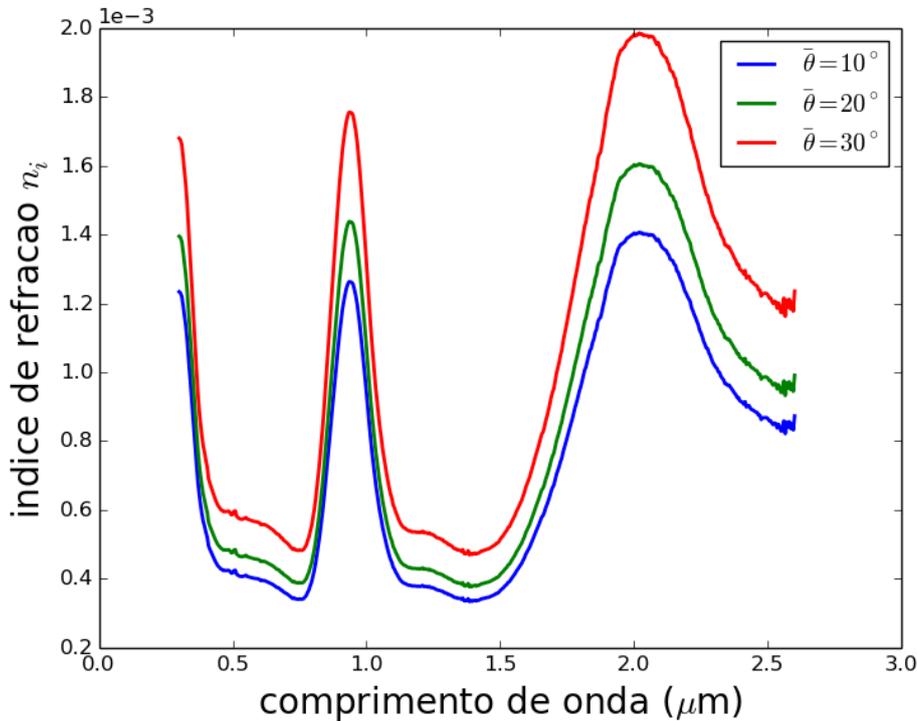


Figura 4.9: Inversão da equação 4.12 para três valores de $\bar{\theta}$, 10° , 20° e 30° graus.

Seque-se uma breve descrição do método empregado para determinar os melhores valores de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média que dão o melhor ajuste ao

espectro de refletância para as amostras de eucrito, diogenito e howardita.

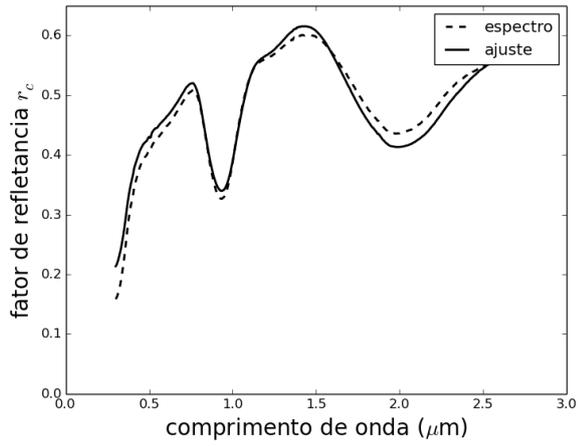
2.3 Determinação dos valores otimizados de D , K e $\bar{\theta}$ para uma sub-amostra de meteoritos HED

Para cada amostra de meteorito determina-se primeiro sua constante ótica imaginária média n_i ; após, empregando-se esta constante ótica para gerar espectros com valores otimizados de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média. Estes valores são obtidos por ajuste ao espectro de refletância para uma sub-amostra de meteoritos HED.

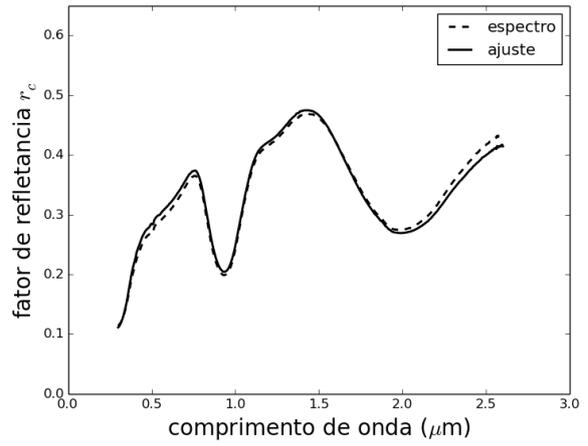
Meteorito eucrito: Allan Hills ALHA76005

A tabela 4.2 mostra os valores otimizados para os seis espectros de refletância tomando em consideração o fator de rugosidade. As três primeiras colunas são os valores iniciais, o diâmetro, o fator de preenchimento dado em porcentagem e o ângulo de inclinação média que é expresso em graus. Estes valores iniciais foram determinados com o mesmo método já explicado anteriormente. As três colunas seguintes são os valores otimizados de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média. Na tabela se pode observar que o fator de porosidade aumenta conforme aumenta o diâmetro médio das partículas nas amostras, exceto para a amostra C que o valor cai a 1.355. O mesmo comportamento se pode observar para o ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$, mas, para as amostras E e F apresentam o mesmo valor de 45° .

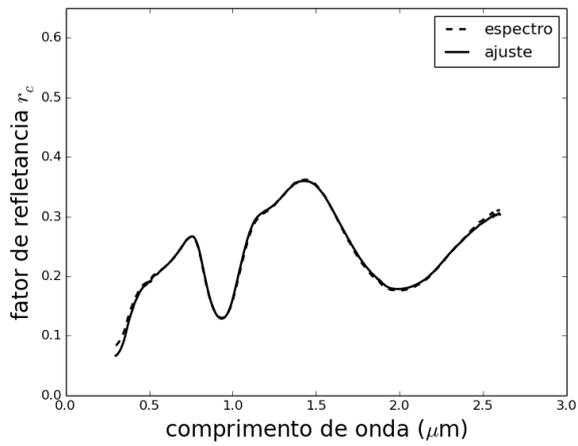
Então, considerando a rugosidade macroscópica pode-se observar uma ligeira melhora na reprodução dos espectros de refletância a partir da nova constante ótica imaginária média n_i ; nova no sentido que inclui o término de rugosidade. Comparando os resultados da Figura 4.8 com a Figura 4.10, a melhora em média é de 0.32%, isto considerando os primeiros 5 espectros. Para o espectro F não se tem um melhor ajuste, aqui é todo o contrario. A Figura 4.8f mostra um valor de 11.82% e a atual Figura 4.10f tem um valor de 12.39%. Portanto, ainda considerando mais um termino na equação de refletância de Hapke, não se tem uma melhora para os dois últimos espectros E e F. O modelo de Hapke tem um melhor ajuste para amostras com diâmetro intermediários. Segundo os resultados o melhor ajuste são para os espectros B e C, com tamanho de grão médio de 60 e 100 μm , respectivamente.



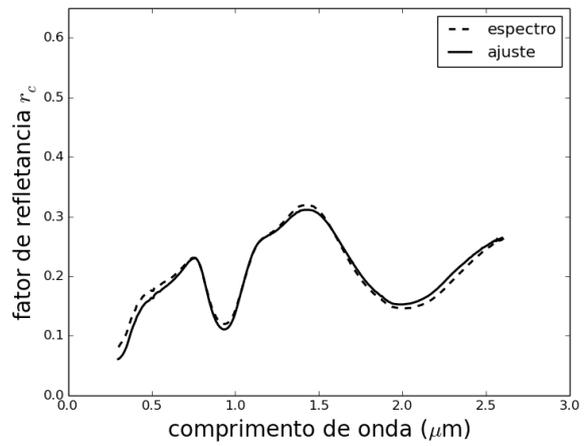
(a)



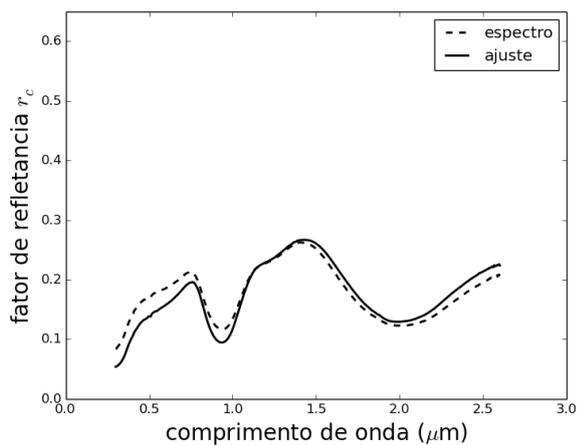
(b)



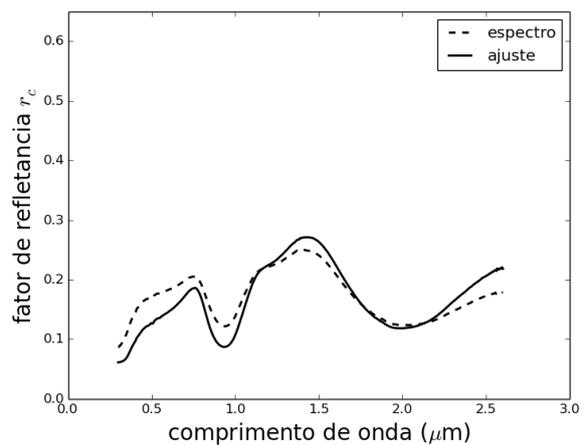
(c)



(d)

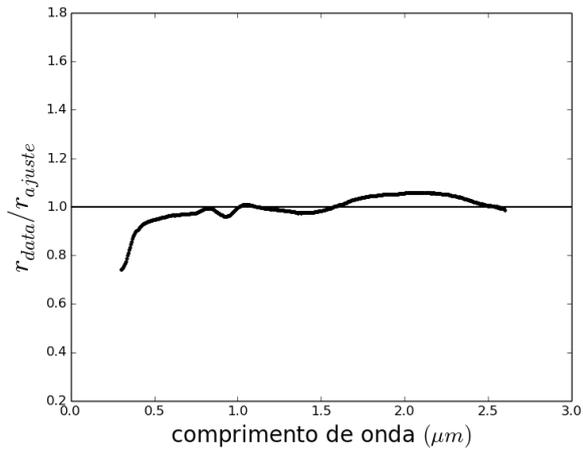


(e)

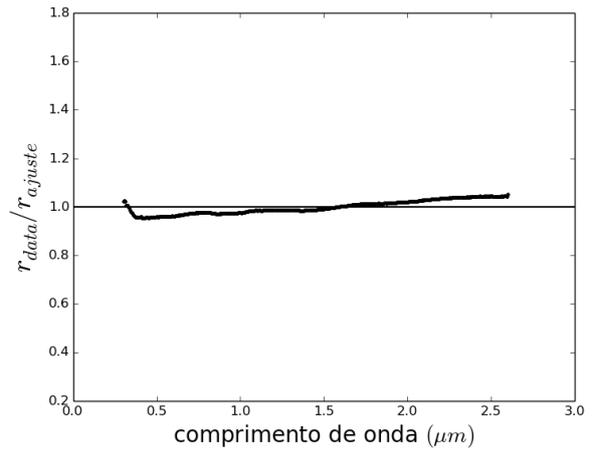


(f)

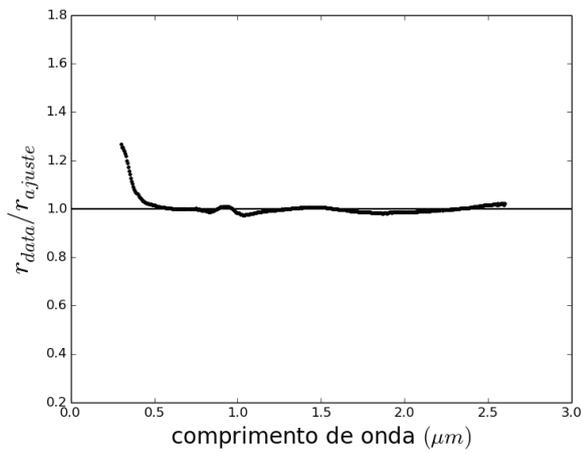
Figura 4.10: A linha tracejada representa o espectro observado e a linha cheia é o espectro ajustado em diâmetro D , fator de porosidade K e rugosidade macroscópica $\bar{\theta}$, com índice de refração real $n_r = 1.5$ e ângulos de incidência, emissão e fase de 30° , 0° , 30° respectivamente.



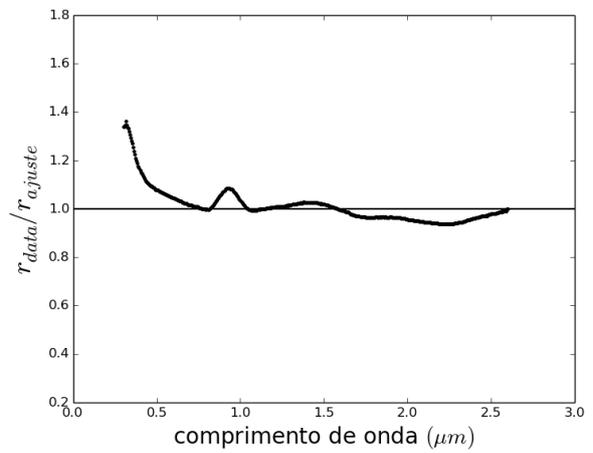
(a)



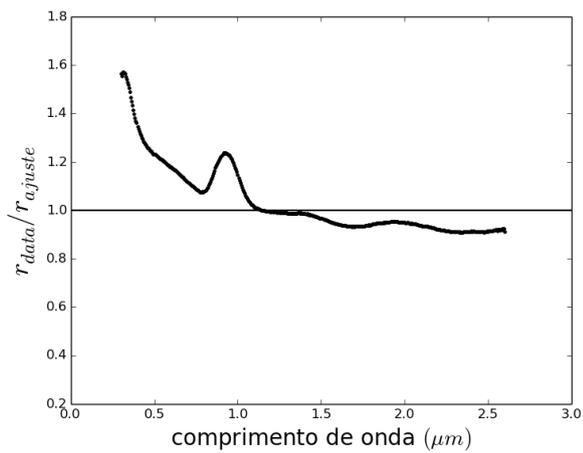
(b)



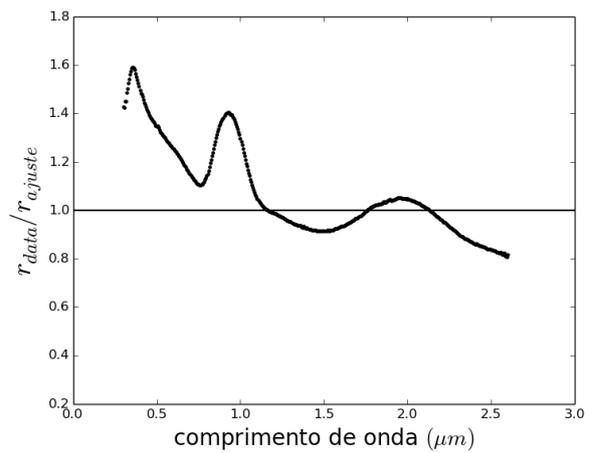
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 4.11: Cada figura é o espectro de refletância dividido entre o melhor ajuste em D , K e $\bar{\theta}$, com índice de refração real $n_r = 1.5$ e, ângulos de incidência, emissão e fase de 30° , 0° , 30° respectivamente. O desvio médio para cada resíduo com respeito à unidade em porcentagem são: (a) 3.84, (b) 2.46, (c) 1.54, (d) 4.26, (e) 9.33 e (f) 12.39.

Meteorito eucrito: Juvinas

Os 5 espectros de refletância mostrados na Figura 4.12a e, seus correspondentes constantes óticas n_i se amostram na Figura 4.12b. O valor diâmetro médio para inverter cada espectro são: 12.5, 35, 60, 100 e 187.5 μm . Os valores médios de fator de preenchimento e ângulo de inclinação média são 0.4 e 22.5°, respectivamente, com $n_r = 1.5$. A linha preta é a constante ótica imaginaria média.

A Figura 4.13 mostra os espectros gerados a partir da constante ótica média n_i com valores otimizados de D , K e $\bar{\theta}$. Para o primeiro espectro Figura 4.13a, seus valores otimizados foram determinados: primeiro fixando o valor de K e variando sobre D e $\bar{\theta}$, logo, se fixo o valor achado de D e K como valor inicial e se passo a variar sobre K . Desta forma obtemos um melhor ajuste. Esta primeira amostra apresenta um intervalo em tamanho de grão entre 0–25 μm , e os valores achados são: $D=22.76 \mu\text{m}$, $K = 2.248$ e $\bar{\theta} = 18.90^\circ$. Como pode ser observado, o espectro não tem um bom ajuste na segunda banda se absorção, na primeira banda não consegui alcançar a profundidade da banda do espectro observado. Também não tem-se um bom ajuste para comprimentos de onda menores a 0.6 μm aproximadamente.

Na Figura 4.13b, observa-se um melhor ajuste quase em todo o comprimento de onda, exceto na região $> 2.0 \mu\text{m}$. Os valores otimizados para este espectro foram determinados fixando primeiro o diâmetro e variando sobre K e $\bar{\theta}$, logo o valor achado de K e $\bar{\theta}$ se fixo como valor inicial e se passo a variar sobre o diâmetro. Esta amostra apresenta um intervalo em tamanho de grão entre 25 – 45 μm e os valores determinados são: $D = 32.36 \mu\text{m}$, $K = 1.224$ e $\bar{\theta} = 15.13^\circ$.

Para o espectro ajustado na Figura 4.13c, com respeito à figura anterior observa-se um melhor ajuste para altos comprimentos de onda, tendo assim um ajuste aceitável. Os melhores valores de D , K e $\bar{\theta}$ foram obtidos: primeiro, fixando o valor inicial de K e variando sobre D e $\bar{\theta}$, segundo, os novos valores determinados de D e $\bar{\theta}$ foram fixados como valor inicial e se passo a variar sobre K . Então, para esta amostra de meteorito que foi preparada a um tamanho de grão entre 45-75 μm , seus valores otimizados achados são: $D = 66.13 \mu\text{m}$, $K = 1.565$ e $\bar{\theta} = 19.14^\circ$.

Na Figura 4.13d, o ajuste não é bom para comprimentos de onda menores a $\sim 0.6 \mu\text{m}$ e maiores a $\sim 2.2 \mu\text{m}$. Também pode-se observar que na primeira banda de absorção a profundidade do ajuste é superior a da amostra e, no segundo máximo o ajuste é menor que o máximo da amostra. Os valores otimizados para este ajuste se determinaram: primeiro fixando seu valor de diâmetro inicial e deixando livres K e $\bar{\theta}$, segundo, os valores determinados de K e $\bar{\theta}$ cada

um se fixo como valor inicial e se passo a variar sobre o diâmetro. Então os valores achados para esta amostra que apresenta um intervalo em tamanho de grão entre $75 - 125 \mu\text{m}$ são: $D = 98.40 \mu\text{m}$, $K = 1.656$ e $\bar{\theta} = 30.74^\circ$.

No último espectro (Figura 4.13d), o ajuste é similar o ajuste da figura anterior, onde o ajuste não é bom para comprimentos de onda menores a $\sim 1.0 \mu\text{m}$ e maiores a $\sim 2.0 \mu\text{m}$. Para a primeira banda de absorção a profundidade do espectro ajustado é maior que a profundidade do espectro da amostra e, para a segunda banda de absorção os mínimos dos dois espectros têm um bom ajuste. Para obter o melhor ajuste se fixo primeiro o valor de K e se ajusto sobre D e $\bar{\theta}$, segundo estes novos valores determinados se fixaram como valor inicial e se passo a variar sobre K . Então, para esta amostra que apresenta um intervalo em tamanho de grão entre $125 - 250 \mu\text{m}$, seus valores otimizados são: $D = 126.17 \mu\text{m}$, $K = 1.714$ e $\bar{\theta} = 45^\circ$.

Na Figura 4.14 mostra os resíduos dos ajustes. O melhor ajuste que se têm são para as amostras MB-TXH-070-B e MB-TXH-070-C, onde seus resíduos médios em porcentagens são 1.29 e 1.26, respectivamente. O pior ajuste é para a amostra MB-TXH-070-E, com um resíduo médio de 6.40. Pode-se observar também que nenhum espectro tem um bom ajuste na primeira banda de absorção.

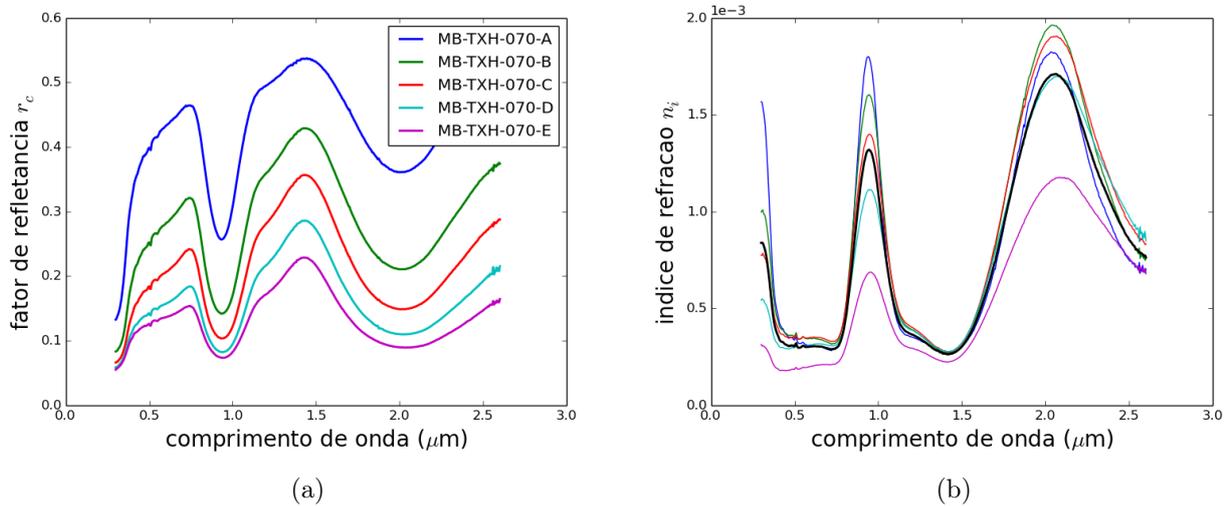
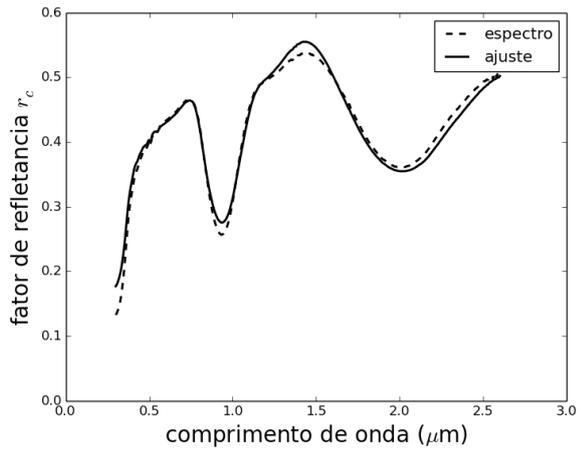
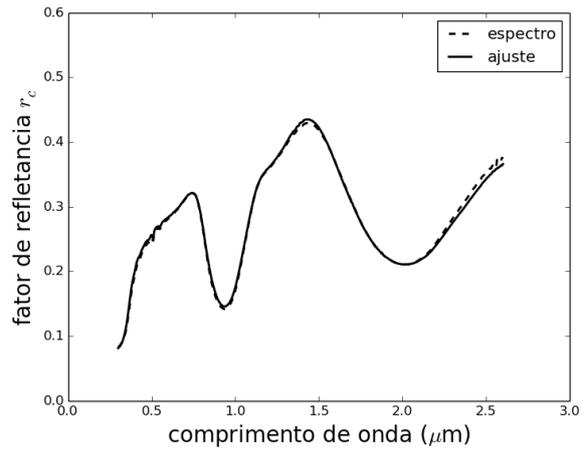


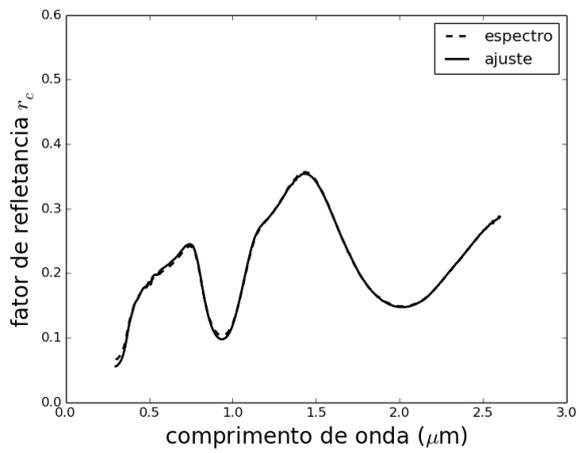
Figura 4.12: (a) mostra os 5 espectros refletância para a amostra Juvinas. (b) são as respectivas constantes óticas n_i que foram obtidas por inversão empregando os valores médios de diâmetro, fator de preenchimento e o ângulo de inclinação média. A linha de cor preto é a constante ótica média.



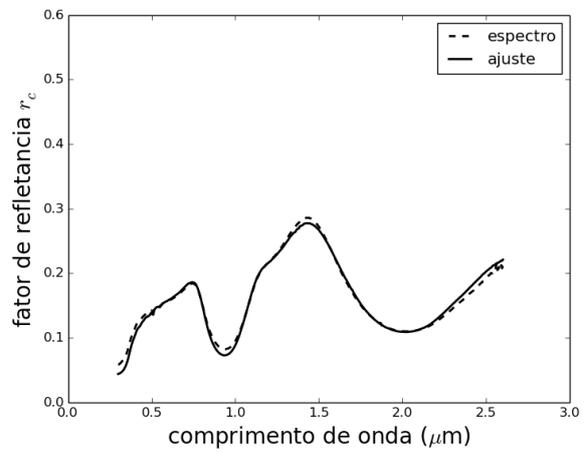
(a)



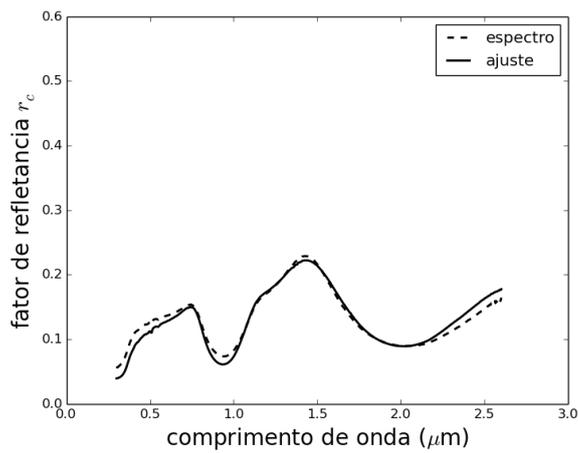
(b)



(c)

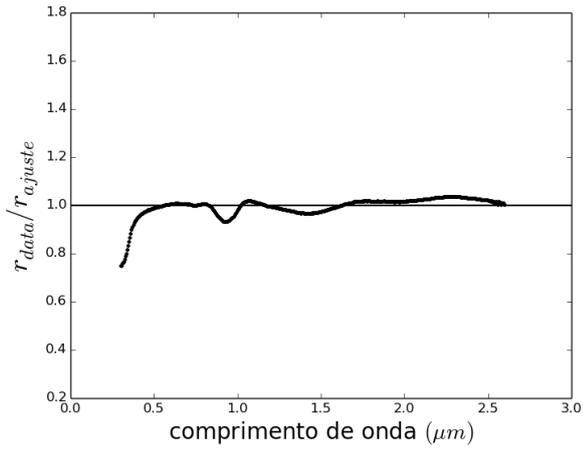


(d)

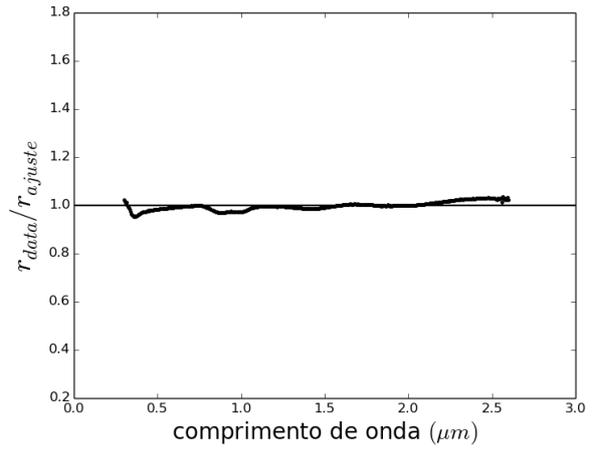


(e)

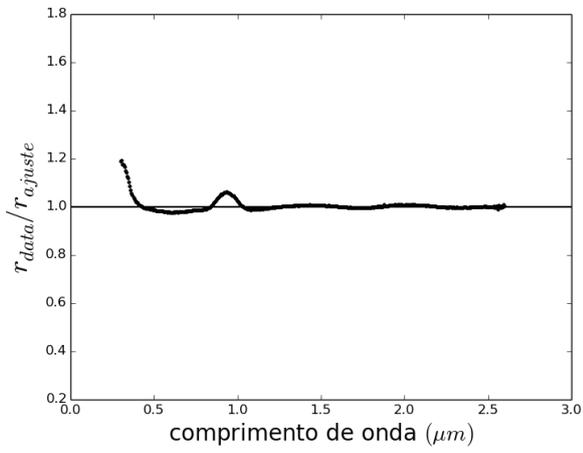
Figura 4.13: Espectros gerados a partir, de seu correspondente constante ótica imaginária média n_i com valores otimizados de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média. O espectro ajustado para cada figura se amostra em linha preta cheia.



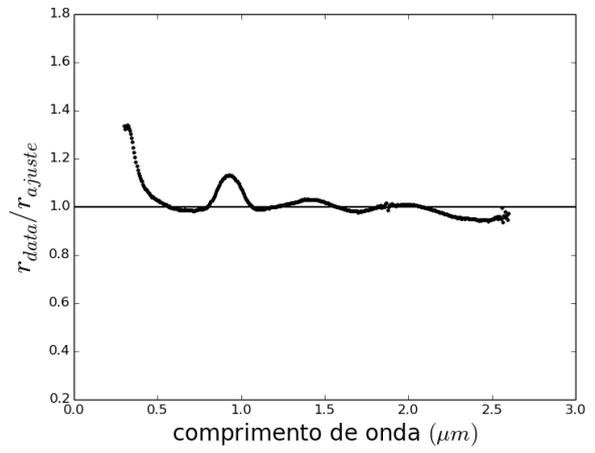
(a)



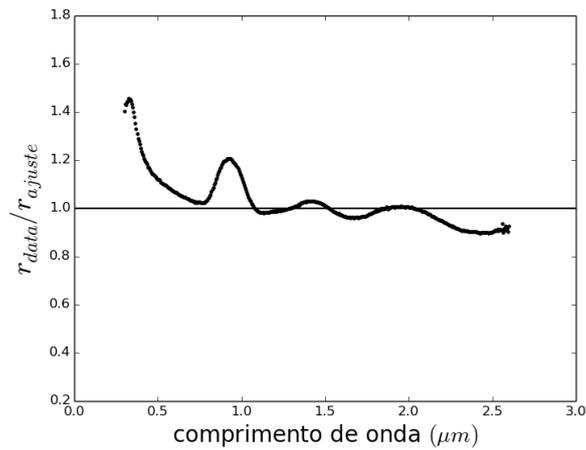
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 4.14: Aqui se mostra o quociente entre o espectro da amostra e o espectro ajustado, em outras palavras, aqui se mostra o resíduo do ajuste. O desvio médio para cada resíduo com respeito à unidade em porcentagem são: (a) 2.74, (b) 1.29, (c) 1.26, (d) 3.45 e (e) 6.40.

Meteorito eucrito: Millbillillie

Na Figura 4.15a, mostra-se os 4 espectros de refletância e, a Figura 4.15b, são as constantes óticas imaginárias n_i obtidas por inversão para cada espectro de refletância empregando a equação 4.12. O valor de diâmetro médio de cada amostra e os valores de fator de preenchimento e ângulo de inclinação média se fixaram a seus valores médios de 0.40 e 22.5° , com $n_r = 1.5$. A constante ótica imaginaria média n_i se mostra em linha de cor preto.

Na Figura 4.16a, mostra-se que o ajuste não é bom para comprimentos de onda menores a $\sim 0.8 \mu\text{m}$ e maiores a $\sim 1.6 \mu\text{m}$. O espectro ajustado na primeira banda de absorção não alcança em profundidade ao espectro da amostra. O caso inverso é observado na segunda banda de absorção. Os valores de diâmetro, fator de preenchimento e ângulo de inclinação média para este espectro são: $13.37 \mu\text{m}$, 1.357 e 16.39° , respectivamente. No processo de minimização o ajuste para obter estes valores se passo primeiro a fixar K e $\bar{\theta}$ e, como segundo passo se fixaram estes novos valores e se variou sobre o diâmetro.

Para a Figura 4.16b, o espectro mostra um bom ajuste em todo seu comprimento de onda. Os valores de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média obtida para esta amostra são: $40.40 \mu\text{m}$, 1.575 e 20.39° respectivamente. Estes valores foram obtidos iguais ao método descrito acima.

O ajuste na Figura 4.16c, é relativamente bom para todo seu comprimento de onda, embora não seja perfeito para curtos e grandes comprimentos de onda. Os valores de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média para esta amostra são: $56.39 \mu\text{m}$, 1.665 e 28.85° . Os procedimentos empregados para obter estes valores foram: primeiro se fixo os valores de K e $\bar{\theta}$ a seus valores iniciais determinados e logo se passo a variar sobre o diâmetro, então, determinado o diâmetro se passo a fixar este como o novo diâmetro inicial e se passo a variar sobre K e $\bar{\theta}$.

Por último o espectro ajustado na Figura 4.16d, pode-se observar que não mostra um bom ajuste para o primeiro máximo e para a segunda banda de absorção. Na primeira banda de absorção a profundidade no espectro ajustado é superior ao espectro da amostra. No procedimento do ajuste primeiro se fixo os valores de K e $\bar{\theta}$ aos valores iniciais determinados e se passo a varia sobre o diâmetro, depois se fixo este valor como diâmetro inicial e se passo a variar sobre K e $\bar{\theta}$. Portanto, os valores de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média são: $87.48 \mu\text{m}$, 2.087 e 41.37° , respectivamente. Os valores elevados tanto de K e $\bar{\theta}$ refletem que não são os corretos para esta amostra, corretos no sentido que não são os valores mais prováveis.

Os resíduos dos espectros ajustados são mostrados na Figura 4.17. Se pode observar que o ajuste não é bom para comprimento de onda menores a $\sim 0.5 \mu\text{m}$ aproximadamente. Neste intervalo de comprimento de onda para os dois primeiros resíduos, mostram um comportamento contrario, para o primeiro resíduo o espectro ajustado é maior que o espectro da amostra e, para o segundo resíduo o espectro ajustado se mostra maior que o espectro da amostra. Os dois últimos resíduos têm o mesmo comportamento. Como pode ser observado o último resíduo não mostra um bom perfil, onde, para comprimentos de onda menor a $\sim 1.4 \mu\text{m}$ o espectro ajustado tem valores maiores que o espectro da amostra, e para comprimentos de onda maiores a este o comportamento é o contrario.

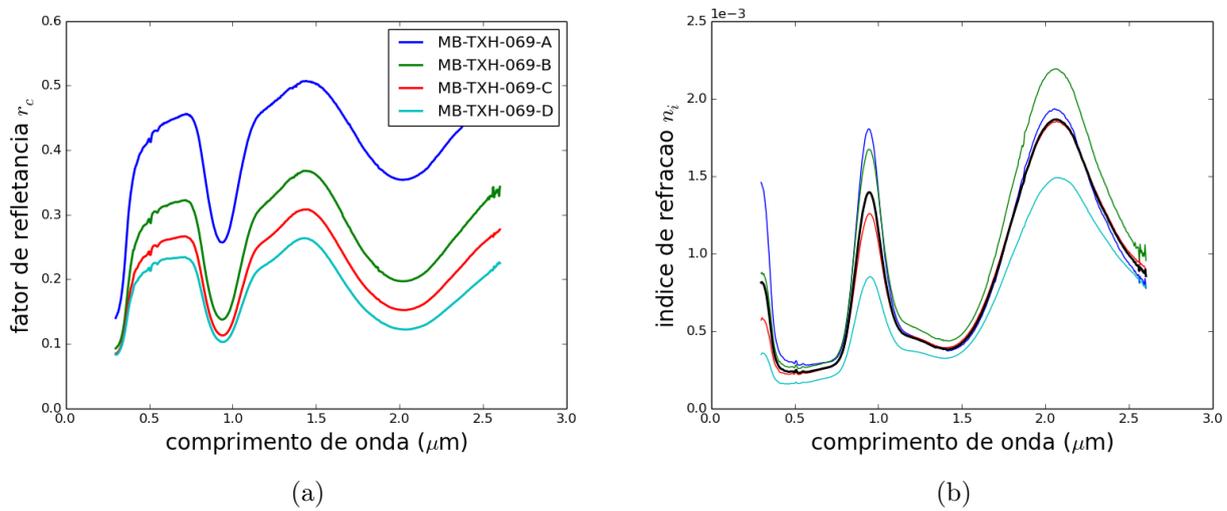
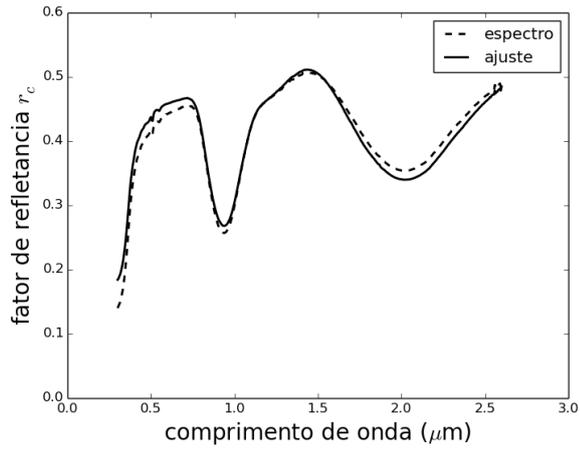
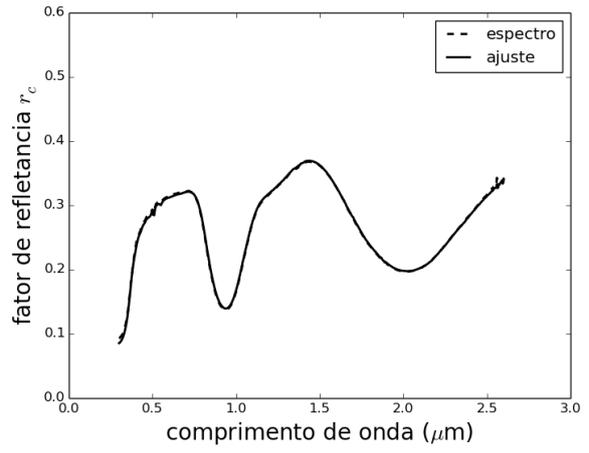


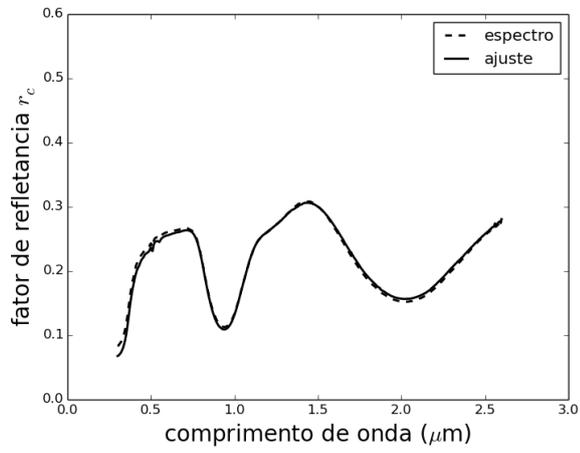
Figura 4.15: (a) mostra os 4 espectros refletância para a amostra Millbillillie. (b) são as respectivas constantes óticas n_i que foram obtidas por inversão empregando os valores médios de diâmetro, fator de preenchimento e o ângulo de inclinação média. A linha de cor preto é a constante ótica imaginária média n_i .



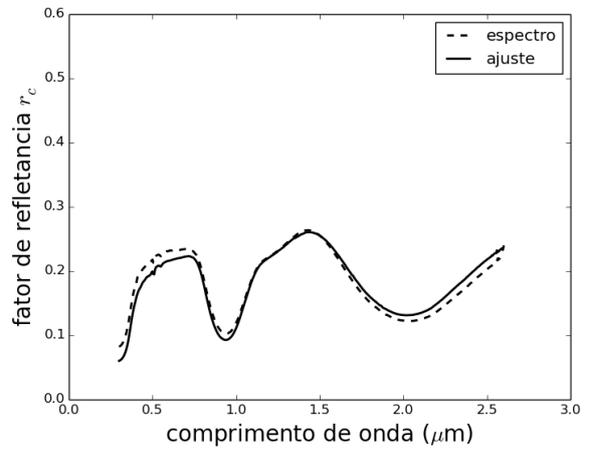
(a)



(b)

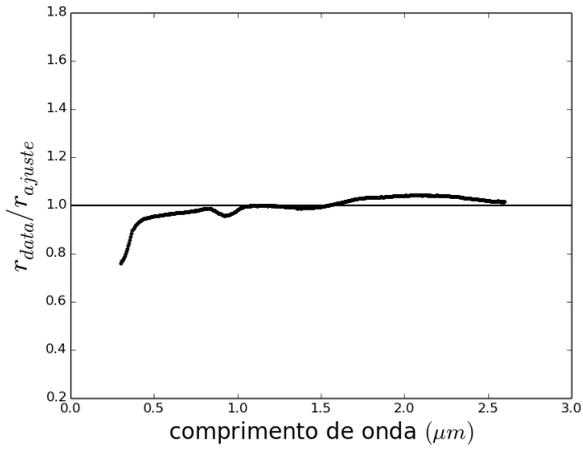


(c)

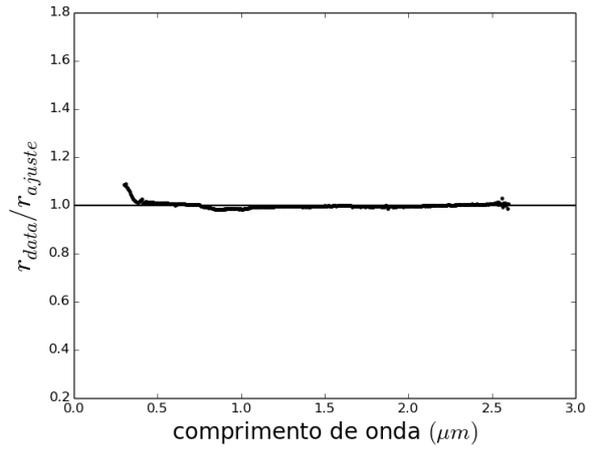


(d)

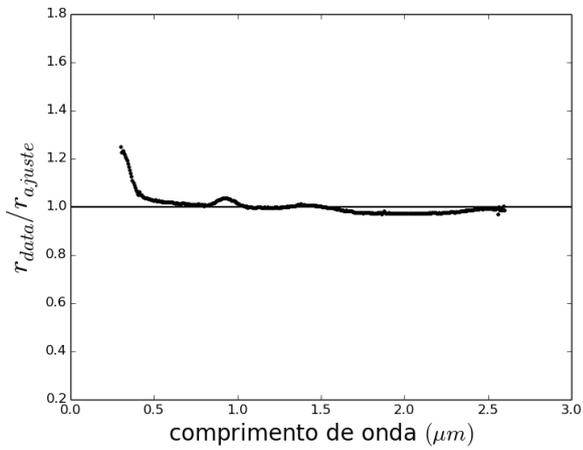
Figura 4.16: Espectros gerados a partir, de seu correspondente constante ótica imaginaria média n_i com valores otimizados de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média. O espectro ajustado para cada figura se amostra em linha preta cheia.



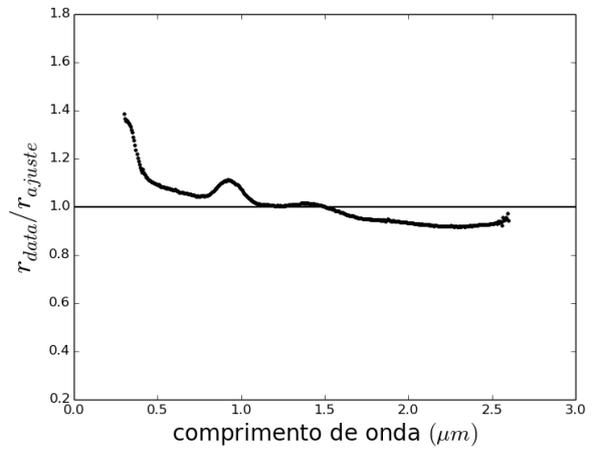
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4.17: Aqui se mostra o quociente entre o espectro da amostra e o espectro ajustado, em outras palavras, aqui se mostra o resíduo do ajuste. O desvio médio para cada resíduo com respeito à unidade em porcentagem são: (a) 3.22, (b) 0.72, (c) 2.16 e (d) 6.25.

No que segue, a Tabela 4.2 são os valores achados para estas amostras. A coluna 1 é o nome da amostra, a coluna 2 estão os valores iniciais de diâmetro, fator de preenchimento (em porcentagem) e o ângulo de inclinação média, a coluna 3 são os valores de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média otimizados.

Tabela 4.2: Diâmetro D , fator de preenchimento ϕ e ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$ otimizados. As primeiras três colunas são os valores iniciais de entrada para a minimização e as seguintes três colunas são os valores obtidos.

Meteoritos eucritos	Valores iniciais			Valores otimizados		
	D (μm)	ϕ (%)	$\bar{\theta}^\circ$	D (μm)	K	$\bar{\theta}^\circ$
ALHA76005: A	16.68	45.97	14.02	20.02 ± 0.07	1.545 ± 0.026	6.70 ± 1.02
ALHA76005: B	40.82	47.17	5.84	45.00 ± 0.007	1.357 ± 0.005	7.73 ± 0.35
ALHA76005: C	60.0	45.77	33.32	72.0 ± 0.37	1.355 ± 0.010	23.39 ± 0.23
ALHA76005: D	99.30	42.14	36.73	119.16 ± 14.88	1.899 ± 0.156	34.86 ± 1.50
ALHA76005: E	192.65	51.36	12.27	154.12 ± 43.33	2.021 ± 0.684	45.0 ± 8.12
ALHA76005: F	369.11	51.19	25.71	295.29 ± 57.35	2.995 ± 0.491	45.0 ± 14.11
Juvinas A	3.09	59.23	8.57	22.76 ± 0.22	2.248 ± 0.006	18.90 ± 0.38
Juvinas B	32.35	55.90	25.13	32.36 ± 0.05	1.224 ± 0.005	15.13 ± 0.24
Juvinas C	60.86	36.95	43.84	66.13 ± 0.15	1.565 ± 0.001	19.14 ± 0.21
Juvinas D	98.31	45.26	14.60	98.40 ± 0.27	1.656 ± 0.010	30.74 ± 0.06
Juvinas E	178.93	43.76	24.40	126.17 ± 1.42	1.714 ± 0.007	45.0 ± 0.1
Millbillillie A	6.23	43.42	24.55	13.37 ± 0.09	1.357 ± 0.019	16.39 ± 0.48
Millbillillie B	40.47	39.49	22.01	40.40 ± 0.03	1.575 ± 0.003	20.04 ± 0.15
Millbillillie C	56.37	17.11	1.74	56.39 ± 0.11	1.665 ± 0.009	28.85 ± 0.42
Millbillillie D	98.47	45.85	21.04	87.48 ± 0.47	2.087 ± 0.026	41.37 ± 1.39

Meteorito diogenito: Elephant Moraine EETA79002

Na Figura 4.18a, mostra-se os 6 espectros de refletância, onde o espectro A tem como intervalo de diâmetro $0 - 25 \mu\text{m}$ e o último espectro F tem $250 - 250 \mu\text{m}$. Como pode-se observar quanto aumenta o tamanho do grão na amostra o espectro de refletância se vê diminuída como um todo, e também tem uma variação gradual da inclinação dos espectros, que começa com uma inclinação positiva espectro A, e termina com uma inclinação negativa espectro F. A Figura 4.18b mostra as constantes óticas n_i obtidas por inversão empregando a equação 4.12, onde o diâmetro para cada amostra foi fixado a seu valor médio, estes são desde a amostra A até F: 12.5, 35, 60, 100, 187.5 e 375 μm e, os valores médios de fator de porosidade e ângulo de inclinação média de 1.6274 e 22.5° respectivamente, com $n_r = 1.5$. A linha em cor preto é a média de todas as constante óticas.

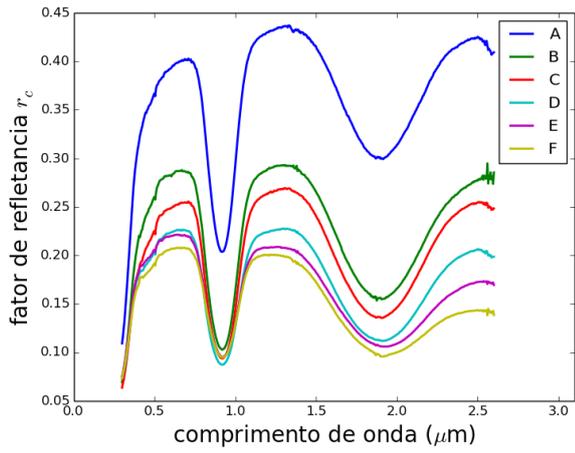
Foram dois os métodos empregados para determinar os valores otimizados de D , K e $\bar{\theta}$. Primeiro, com os valores iniciais achados se deixou livre as três variáveis para ajustar a espectro

de cada amostra empregando a equação 4.12 utilizando a constante ótica média, o segundo método consistiu em deixar livre uma variável à vez, por exemplo, primeiro se varia sobre o diâmetro fixando o fator de porosidade e o ângulo de inclinação média, logo se fixa o novo valor de diâmetro como diâmetro inicial e se passa a variar sobre o fator de porosidade, e assim por diante.

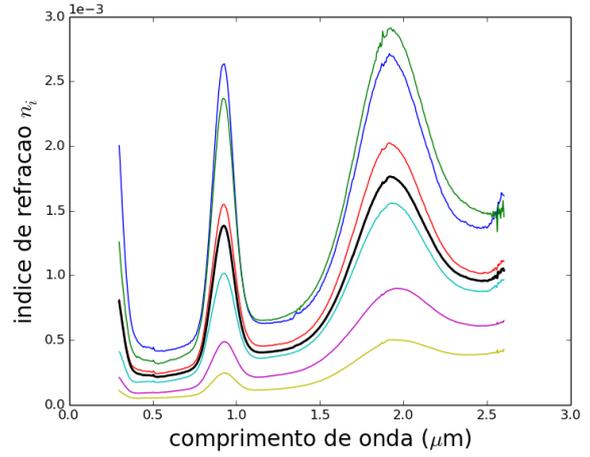
Na tabela 4.3, mostram-se os valores obtidos pelos dois métodos acima mencionados, onde as primeiras 6 amostras correspondente a primeiro método e as seguintes 6 o segundo método. Então, os valores achados de diâmetro pelo primeiro método para as amostras A, B, C, D e F caem no limite superior permitido. Para o segundo método, as amostras que caem no limite superior em diâmetro são B, E e F. Para os valores otimizados de K , estes se incrementam quando o tamanho dos grãos das amostras aumenta, este comportamento é igual para os dois métodos, mas, para a amostra A no primeiro método, seu valor de K é maior que o segundo e terceiro valor. Para o segundo método, o valor de K para a amostra A é maior que o segundo, terceiro e quarto valor. Os dois últimos valores pelo primeiro método caem no limite superior dos valores permitidos de K , para o segundo método é a amostra F que cae no limite superior. Para os valores determinados de $\bar{\theta}$, se têm um aumento progressivo a partir da segunda amostra, este para o primeiro método, mas, o último valor é menor que todos. Para os valores obtidos pelo segundo método, o comportamento é similar, mas, o valor decresce a partir da amostra D.

Como se observa nas Figuras 4.19, os ajustes pelos dois métodos não são muitos distintos. Como já se vem estudando tem-se um melhor ajuste para valores intermediários de tamanho de grão. A maior diferença entre os dois métodos são para a amostra B e a amostra C. Para a amostra B, pelo primeiro método o valor de diâmetro determinado é igual a valor achado pelo segundo método, para o valor de K é menor que o valor encontrado pelo segundo método, que também é menor para o valor de $\bar{\theta}$. Para a amostra C, o diâmetro determinado pelo primeiro método é maior que o valor achado pelo segundo método, para o valor de K também é maior e, para o valor de $\bar{\theta}$ o valor é menor pelo segundo método.

Na Figura 4.20, os resíduos médios em porcentagem para os ajustes de A até F empregando o primeiro método são: 3.99, 1.48, 1.32, 4.01, 8.87, 11.55 e, para o segundo método são: 4.04, 2.69, 4.23, 4.48, 9.20 e 11.55. Exceto para o ajuste da amostra F que têm igual resíduo, a diferença em média é de 0.99%.

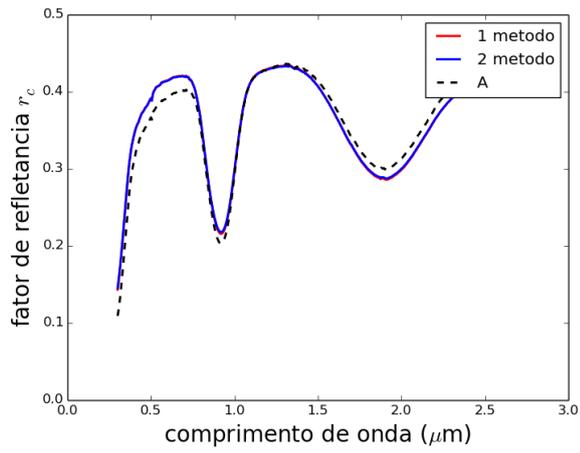


(a)

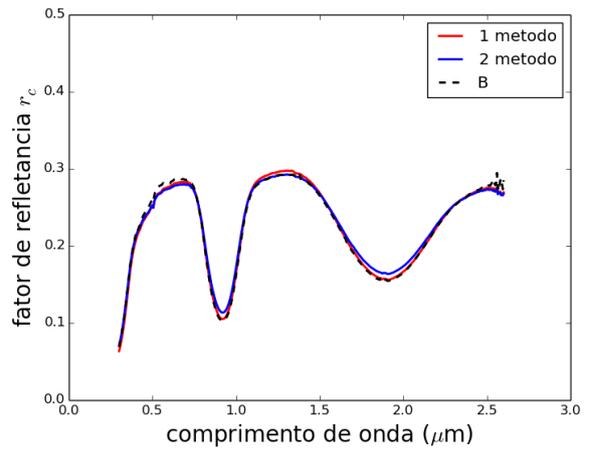


(b)

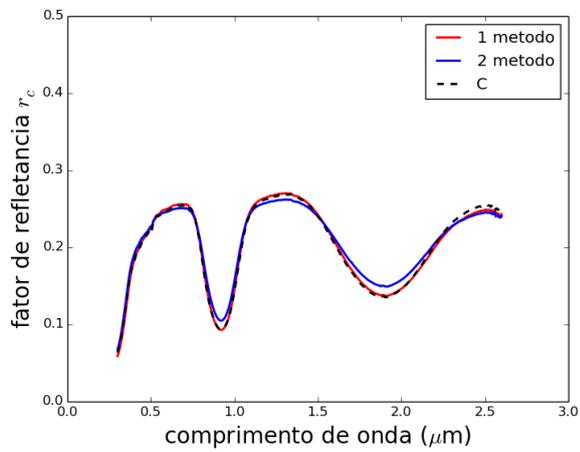
Figura 4.18: (a) mostra os 6 espectros de refletância para esta amostra de meteorito diogenito. (b) são as constantes óticas imaginarias obtidas por inversão de equação de Hapke 4.12, considerando valores médio de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média de, para a amostra A: $12.5 \mu\text{m}$, amostra B: $35 \mu\text{m}$, amostra C: $60 \mu\text{m}$, amostra D: $100 \mu\text{m}$, amostra E: $187.5 \mu\text{m}$, amostra F: $375 \mu\text{m}$ e os valores de K , $\bar{\theta}$ para todos são 1.6274 e 22.5° respectivamente. A linha de cor preto é a constante ótica imaginária média n_i .



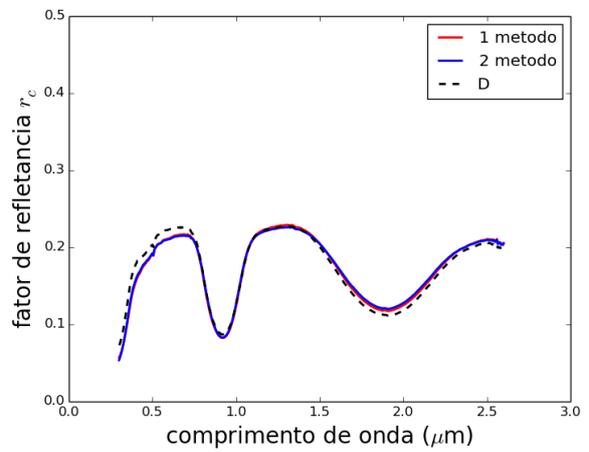
(a)



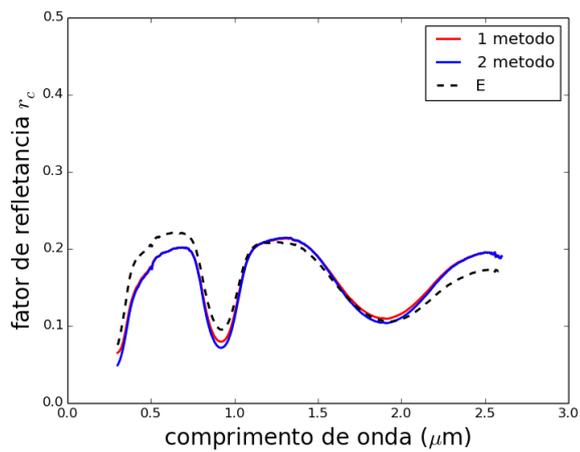
(b)



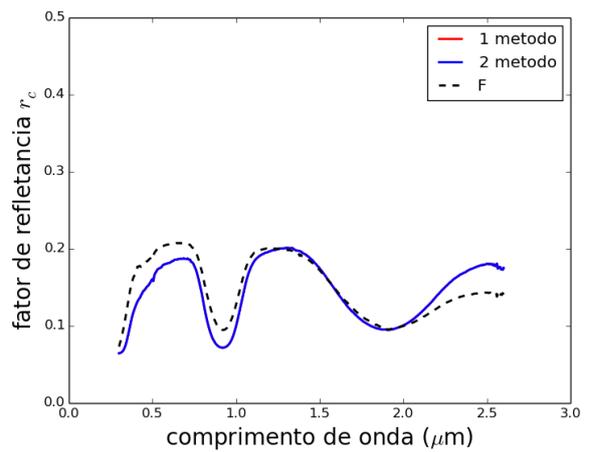
(c)



(d)

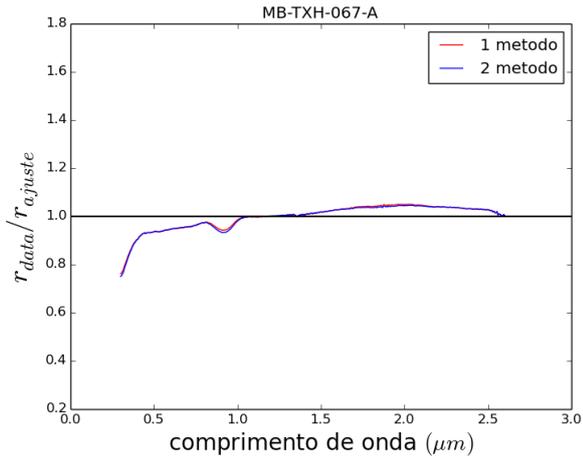


(e)

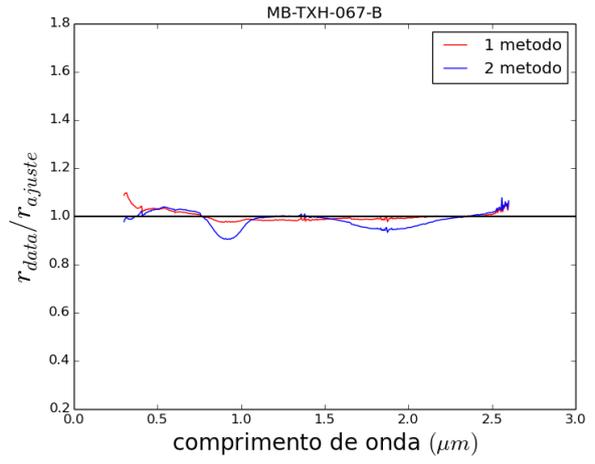


(f)

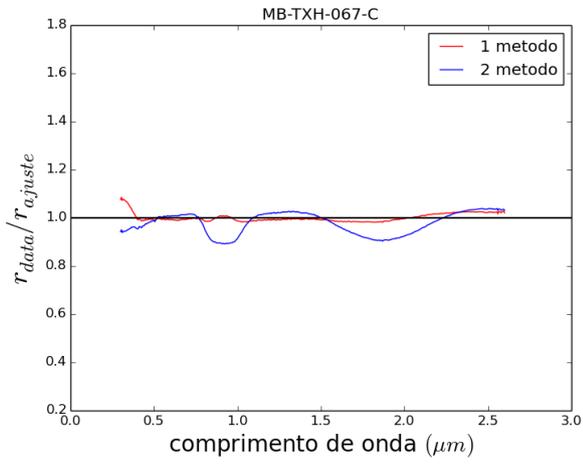
Figura 4.19: Espectros ajustados com valores otimizados de D , K e $\bar{\theta}$. A linha de cor vermelho é para o primeiro método de ajuste e linha de cor azul é para o segundo método de ajuste. A linha tracejada é o espectro da amostra.



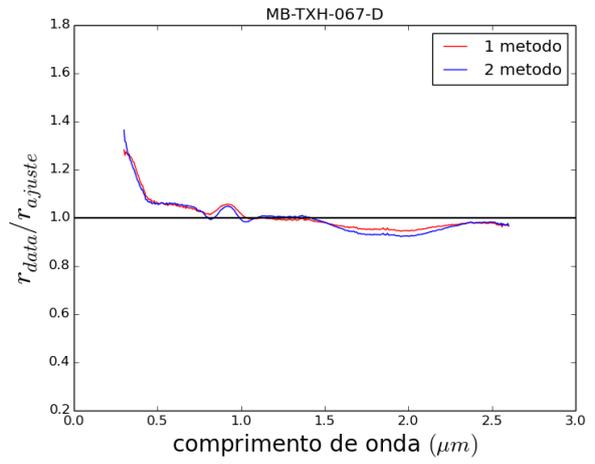
(a)



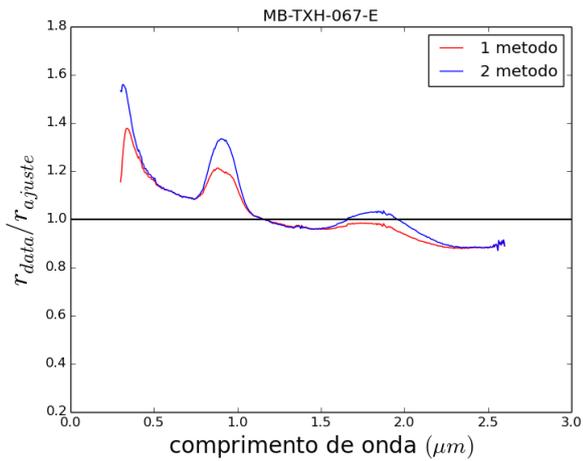
(b)



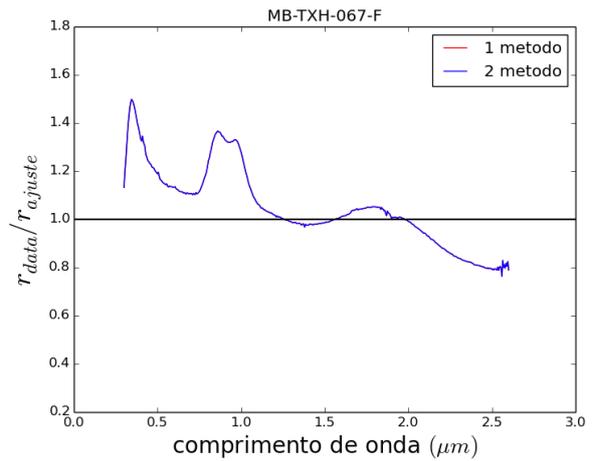
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 4.20: Estes são os resíduos que são obtidos ao dividir o espectro de cada amostra entre o espectro ajustado com valores otimizados de D , K e $\bar{\theta}$. Para o primeiro método são: 3.99, 1.48, 1.32, 4.01, 8.87, 11.55; e para o segundo método são: 4.04, 2.69, 4.23, 4.48, 9.20 e 11.55.

No que segue, a Tabela 4.3 são os valores achados para estas amostras. A coluna 1 é o nome da amostra, a coluna 2 estão os valores iniciais de diâmetro, fator de preenchimento (em porcentagem) e o ângulo de inclinação média, a coluna 3 são os valores de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média otimizados.

Tabela 4.3: Diâmetro D , fator de preenchimento ϕ e ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$ otimizados. As primeiras três colunas são os valores iniciais de entrada para a minimização e as seguintes três colunas são os valores obtidos.

Meteorito diogenito	Valores iniciais			Valores otimizados		
	D (μm)	ϕ (%)	$\bar{\theta}^\circ$	D (μm)	K	$\bar{\theta}^\circ$
EETA79002: A	18.77	43.22	19.23	25.0 ± 1.65	1.802 ± 0.329	18.73 ± 2.06
EETA79002: B	35.0	30.64	26.16	45.0 ± 1.0	1.226 ± 0.253	15.65 ± 0.75
EETA79002: C	60.26	41.73	36.82	75.0 ± 0.21	1.778 ± 0.130	20.52 ± 0.81
EETA79002: D	101.43	41.19	37.12	125.0 ± 10.09	2.431 ± 0.330	36.58 ± 2.41
EETA79002: E	185.31	46.06	24.94	197.61 ± 37.52	3.211 ± 0.420	45.0 ± 5.82
EETA79002: F	367.58	45.60	31.90	250.0 ± 29.98	3.211 ± 0.274	10.20 ± 24.20
EETA79002: A	18.77	43.22	19.23	23.05 ± 0.12	1.701 ± 0.007	19.20 ± 0.22
EETA79002: B	35.0	30.64	26.16	45.00 ± 0.02	1.403 ± 0.003	25.47 ± 0.15
EETA79002: C	60.26	41.73	36.82	57.22 ± 0.21	1.672 ± 0.005	35.71 ± 0.21
EETA79002: D	101.43	41.19	37.12	76.37 ± 0.30	1.655 ± 0.005	36.74 ± 0.30
EETA79002: E	185.31	46.06	24.94	125.00 ± 0.54	2.079 ± 0.014	27.79 ± 1.14
EETA79002: F	367.58	45.60	31.90	250.00 ± 6.41	3.211 ± 0.025	10.16 ± 6.64

Meteorito howardita: Elephant Moraine EET87503

Para esta amostra se têm 6 distribuições de grão, onde os limites de tamanho medidos são: 0 – 25, 25 – 45, 45 – 75, 75 – 125, 125 – 250 e 250 – 500, estas medidas estão dadas em microns. Na Figura 4.21a se pode observar os 6 espectros para esta amostra. A Figura 4.21b são as constantes óticas obtidas por inversão de cada espectro de refletância utilizando a equação 4.12, empregando seus valores médios de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média. Os diâmetros médios são a media dos diâmetros limites para cada amostra, então para a amostra A seu diâmetro médio será de $12.5 \mu\text{m}$, para a amostra B será de $35 \mu\text{m}$, e assim por diante. Os valores médios de fator de porosidade e ângulo de inclinação média para todas são: 1.6274 e 22.5° respectivamente. Aqui a linha de cor preto é a média das 6 constantes óticas.

Na Figura 4.22, mostra-se os espectros ajustados para D , K e $\bar{\theta}$ empregando a constante

ótica média n_i . Para a determinação dos mesmos, primeiro se deixou livre o diâmetro e se fixaram os valores de K a $\bar{\theta}$ a seus valores iniciais determinados, logo o diâmetro determinado se fixo como novo diâmetro inicial e se passou a variar sobre K , o valor achado de K se fixo como novo valor inicial e, por último se variou sobre $\bar{\theta}$ deixando fixo as variáveis D e K a seus novos valores. Então, os valores determinados se mostram na Tabela 4.4. A razão de porque se escolheu este método de ajuste e não se deixou livre as três variáveis, é que os valores de diâmetro achado pelo segundo método caem no limite superior do intervalo permitido, isto para as primeiras quatro amostras. Os melhores ajustes são para os espectros B e C. Não se tem um bom ajuste para a amostra A que tem um tamanho de grão médio de 12.5μ e para as amostras D, E e F de tamanho de grão médio: 100 , 187.5 e $375 \mu\text{m}$ respectivamente.

Na Tabela 4.4, o valor otimizado de K começa recém a incrementar-se a partir da amostra C e, para o valor otimizado de $\bar{\theta}$, este começa a incrementar-se a partir da amostra C, mas, logo diminui a 18.05° para a amostra F.

Na Figura 4.23, mostra-se os resíduos para os 6 espectros ajustados. Estas figuras são os espectros das amostras dividido entre os espectros ajustados. Os resíduos médios em porcentagens das amostras de A até F são: 5.49 , 2.90 , 4.44 , 6.32 , 10.12 e 12.37 .

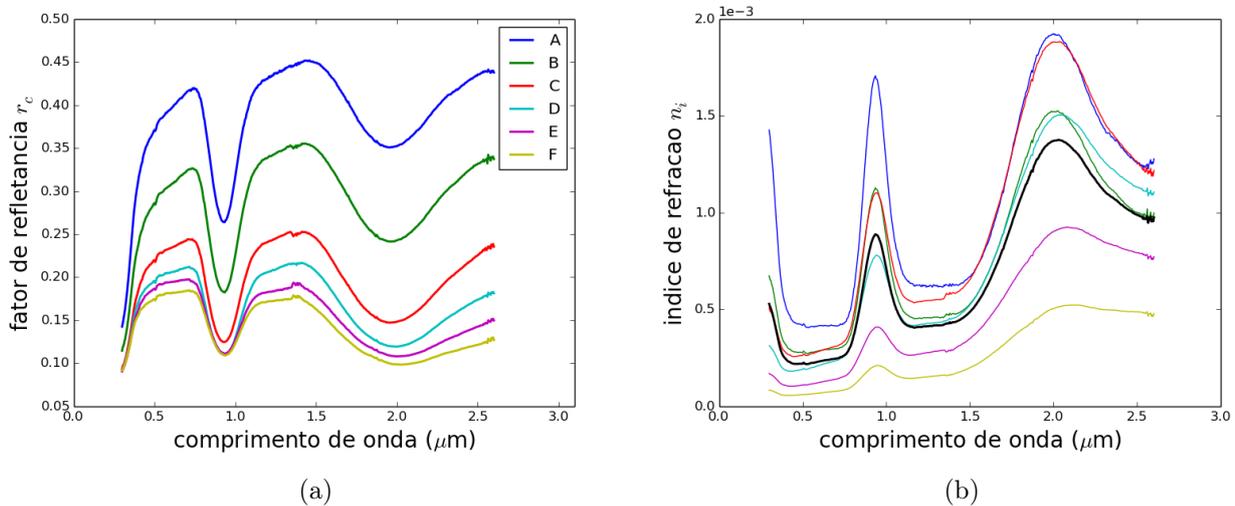
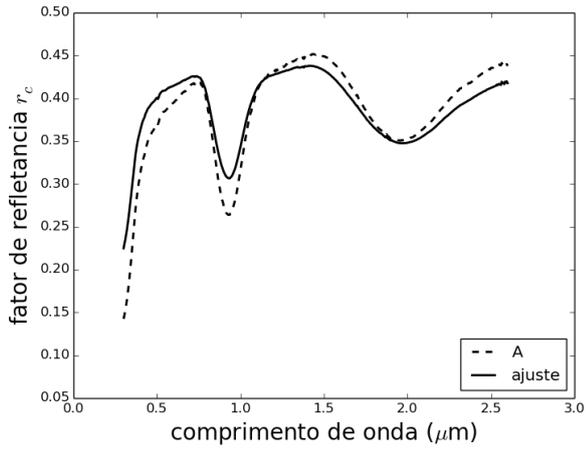
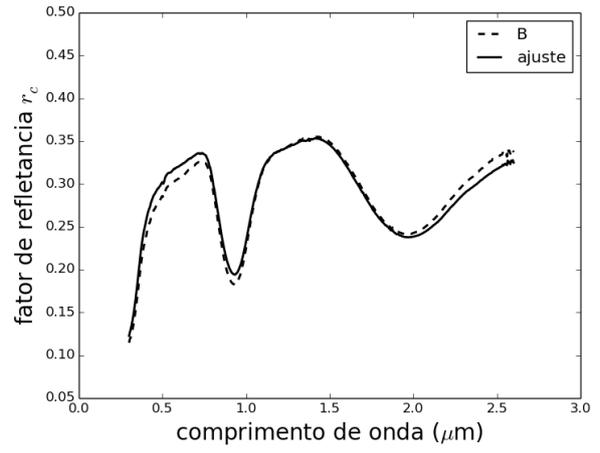


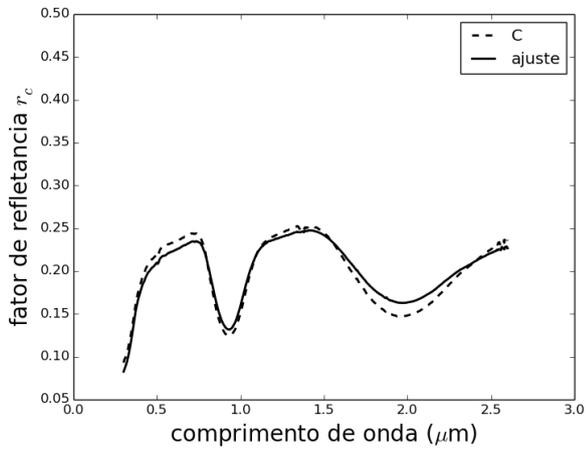
Figura 4.21: (a) são os espectros de refletância para as 6 amostras, (b) suas respectivas constantes óticas, onde a linha de cor preto é a constante ótica imaginária média n_i .



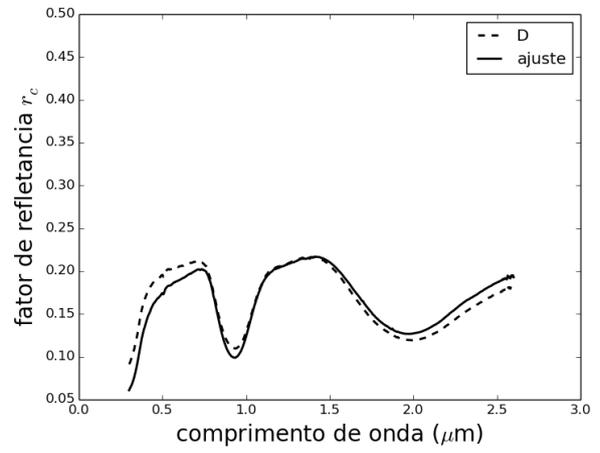
(a)



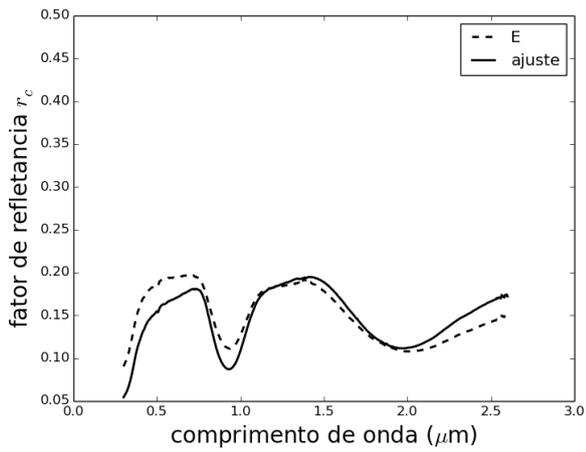
(b)



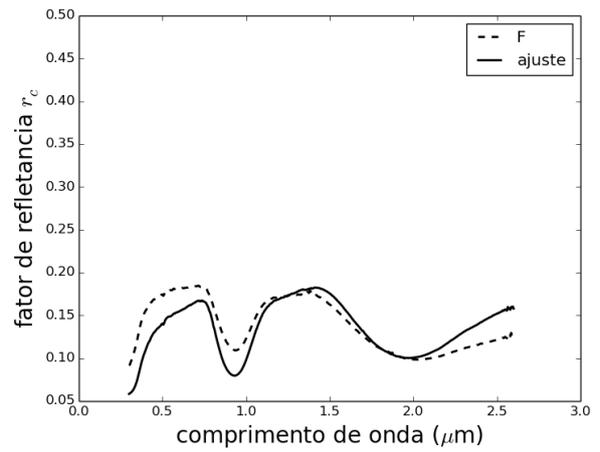
(c)



(d)

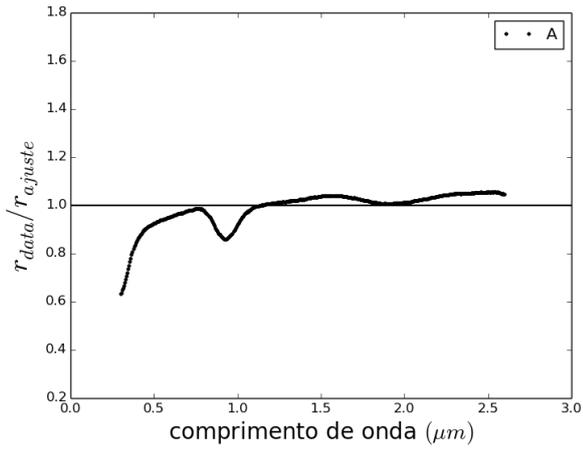


(e)

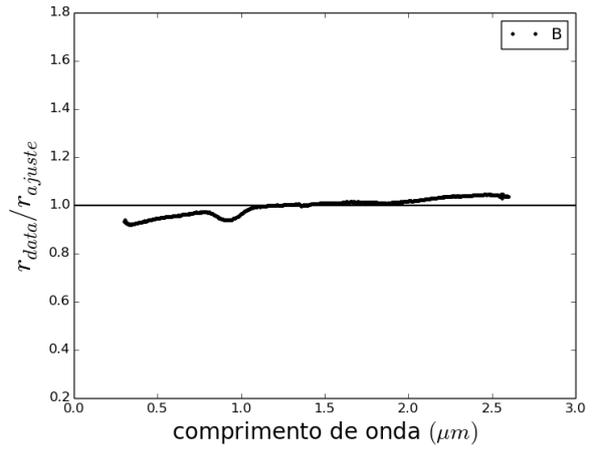


(f)

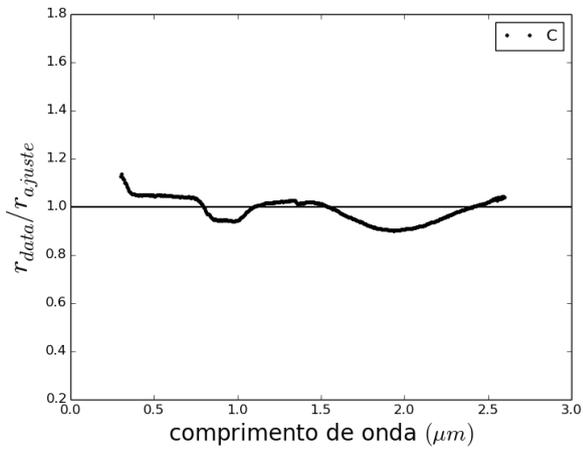
Figura 4.22: Aqui se mostram os espectros ajustados em linha cheia, a linha tracejada é o espectro da amostra.



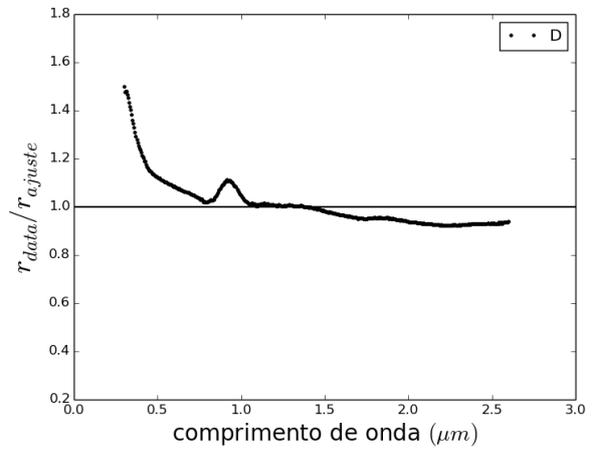
(a)



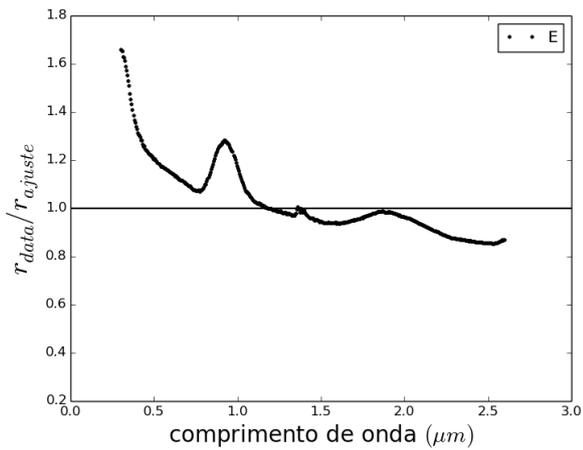
(b)



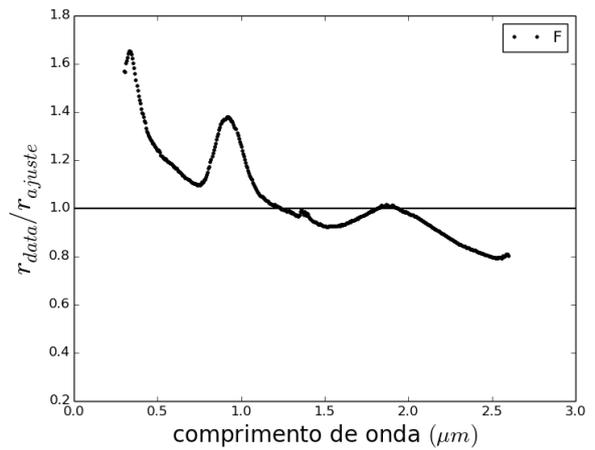
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 4.23: Estas figuras mostram os resíduos dos ajustes, que é o espectro da amostra dividido entre o espectro ajustado. Os resíduos médios em porcentagens para a (a) até a (f) são: 5.49, 2.90, 4.44, 6.32, 10.12 e 12.37.

No que segue, a Tabela 4.4, são os valores achados para esta amostra. A coluna 1 é o nome da amostra, a coluna 2 estão os valores iniciais de diâmetro, fator de preenchimento (em porcentagem) e o ângulo de inclinação média, a coluna 3 são os valores de diâmetro, fator de porosidade e ângulo de inclinação média otimizados.

Tabela 4.4: Diâmetro D , fator de preenchimento ϕ e ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$ otimizados. As primeiras três colunas são os valores iniciais de entrada para a minimização e as seguintes três colunas são os valores obtidos.

Meteorito howardita	Valores iniciais			Valores otimizados		
	D (μm)	ϕ (%)	$\bar{\theta}^\circ$	D (μm)	K	$\bar{\theta}^\circ$
EET87503,97 A	16.68	57.60	30.69	22.39 ± 0.22	2.182 ± 0.012	30.13 ± 0.28
EET87503,97 B	33.59	41.19	19.87	42.04 ± 0.13	1.654 ± 0.005	19.72 ± 0.20
EET87503,97 C	59.65	28.09	37.41	54.80 ± 0.23	1.413 ± 0.005	36.73 ± 0.22
EET87503,97 D	100.85	43.27	28.93	102.15 ± 0.53	1.702 ± 0.008	29.30 ± 0.59
EET87503,97 E	185.48	46.27	29.93	125.25 ± 1.02	1.777 ± 0.013	31.82 ± 1.10
EET87503,97 F	373.78	52.72	1.74	250.00 ± 5.68	2.747 ± 0.022	18.05 ± 4.15

2.4 Discussões

Podemos observar deste teste que, a constante ótica média não é a mais adequada para representar as propriedades óticas das amostras estudadas. Com esta constante ótica é possível reproduzir os espectros das amostras de maneira satisfatória só para dois intervalos de tamanho grão, que são: 25 – 45 e 45 – 75 microns. Estes são os intervalos em onde o espectro ajustado tem o menor resíduo com respeito ao espectro da amostra, exceto para a amostra Howardita EETA87503 onde seu resíduo é alto, como será discutido na próxima seção. Com respeito aos parâmetros obtidos, podemos observar que o fator de porosidade K se incrementa conforme a distribuição de tamanho das partícula aumenta. Na Figura 4.24, mostra-se os valores obtidos de K contra o diâmetro determinado para todas as amostras. Pode-se observar uma clara correlação de K contra D , exceto claro está, para os dois triângulos que tem um valor inicial de K maior a 2.0. Estes valores correspondem para as amostras dos meteoritos eucrito Juvinas e howardita EETA87503. Segundo Hapke (2002), partículas muito finas são coesos e possuem valores baixos de fator de preenchimento ϕ , o que quer dizer que tem altos valores de porosidade, e que partículas mais grossas apresentam valores altos de ϕ . Então, isto poderia explicar os valores achados para K .

A tendência para o ângulo de inclinação média $\bar{\theta}$ não é muito óbvia. Parece que se incrementa quando o tamanho do grão da amostra também se incrementa. Isto pode ser observado para os valores achados para os meteoritos eucritos (Tabela 3.1), mas para os outros meteoritos não se observa uma clara tendência. Este ponto falta maior exploração e será tema de estudo no futuro próximo.

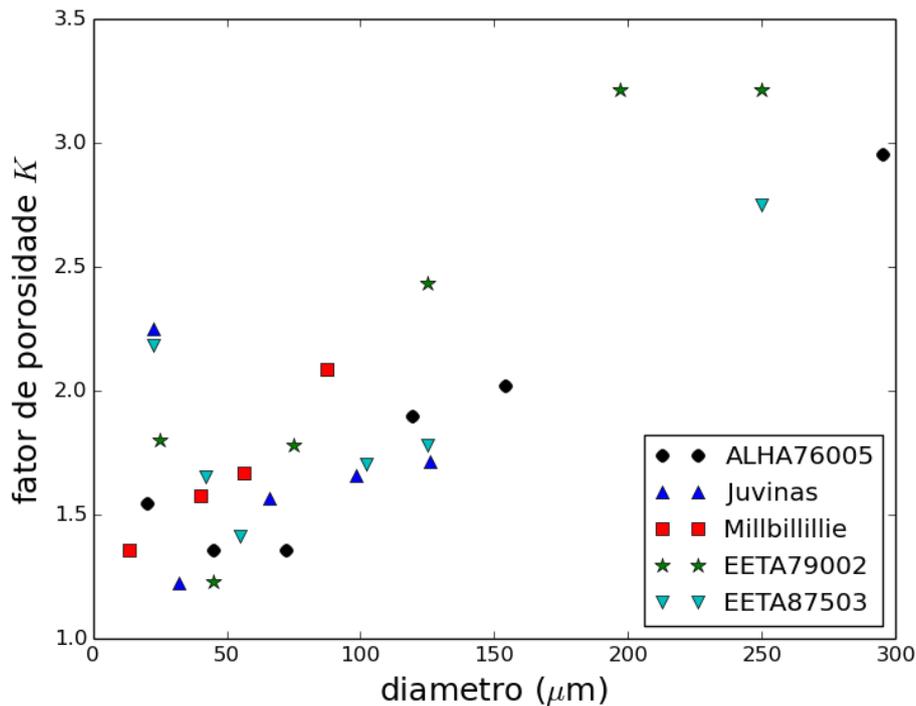


Figura 4.24: Fator de porosidade K contra o diâmetro determinado para as cinco amostras de meteoritos.

3 Implementação final - Procurando soluções consistentes

Como se observou na seção 2, ao inverter os espectros de refletância, assumindo valores médios para as variáveis, o que se obtém são distintas constantes óticas, um para cada espectro. Nesta parte, se procuraram um conjunto de valores possíveis dos parâmetros que, ao momento de fazer a inversão dos espectros convergem há uma única constante ótica. Depois é ver se esta solução é uma solução única. Um problema com os métodos usados nas seções anteriores é que os valores de n_r não são em geral conhecidos para os meteoritos que se deseja analisar. Seria importante então incluir o índice de refração real como um dos parâmetros a serem ajustados. Por conta disto, nesta seção vamos usar a letra k_λ para designar o índice de refração imaginário e n para designar o índice de refração real.

Os modelos usados até aqui, também tendem a falhar para amostras com maiores tamanhos de grão. Observa-se que nos espectros medidos o aumento dos diâmetros das partículas nas amostras levam a uma diminuição do contraste dos espectros, mas esta diminuição não é uniforme em todo o comprimento de onda.

Os efeitos considerados até aqui são capazes de acomodar variações de contrastes, mas de forma homogênea em comprimento de onda. Isto particularmente é visível nas figuras 4.10, 4.19 e 4.22, onde as constantes óticas médias não são capazes de reproduzir a variação relativa de contraste para os diâmetros maiores. Uma alternativa seria considerar o efeito de espalhadores internos no cálculo do albedo de espalhamento simples. Então, o albedo de espalhamento simples será:

$$\omega = S_e + (1 - S_e) \frac{1 - S_i}{1 - S_e \Theta} \Theta \quad (4.13)$$

onde

$$S_e = 0.0587 + 0.8543R(0) + 0.0870R(0)^2 \quad (4.14)$$

$$S_i = 1 - \frac{1}{n^2} [0.9413 - 0.8543R(0) - 0.0870R(0)^2] \quad (4.15)$$

$$R(0) = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} \quad (4.16)$$

$$\Theta = \frac{r_i + \exp(-\sqrt{\alpha(\alpha + s)} \langle D \rangle)}{1 + r_i \exp(-\sqrt{\alpha(\alpha + s)} \langle D \rangle)} \quad (4.17)$$

$$\alpha = 4\pi k / \lambda \quad (4.18)$$

$$r_i = \frac{1 - \sqrt{\alpha/(\alpha + s)}}{1 + \sqrt{\alpha/(\alpha + s)}} \quad (4.19)$$

Aqui temos a varias expressões empregadas para determinar o albedo de espalhamento simples. Como pode-se observar, o fator de transmissão interna (Equação 4.17), tem mais uma

variável, que é o coeficiente de espalhamento interno s . Usualmente trabalhos que empregam este modelo tendem a considerar s como uma constante. Isto é assumido por simplicidade, na verdade se deveria esperar que s também dependa do comprimento de onda, da mesma forma funcional como o coeficiente de absorção, em outras palavras, inversamente proporcional ao comprimento de onda. Então s será:

$$s = s_0/\lambda \tag{4.20}$$

onde s_0 é a nova contante ao determinar.

Nas figuras 4.25 e 4.26, mostram-se o efeito de se usar espalhamento interno considerando e sem considerar a dependência em comprimento de onda. Usar valores constantes de s não produz uma variação do contraste com comprimento de onda, que por outro lado são claras quando a dependência suposta é considerada. Este último modelo foi então adotado. Note que a dependência do albedo em s aparece na equação 4.17 e é proporcional ao diâmetro, de modo que esta variação relativa de contraste tende a ser maior para partículas maiores.

Também se verificou tanto efeitos de porosidade quanto o efeito de rugosidade macroscópica são capazes de afetar o contraste. Estes efeitos no entanto atuam de forma semelhante na expressão da reflectância e incluir os dois induz uma indeterminação na inversão. Por isso se considerou aqui apenas o efeito de porosidade.

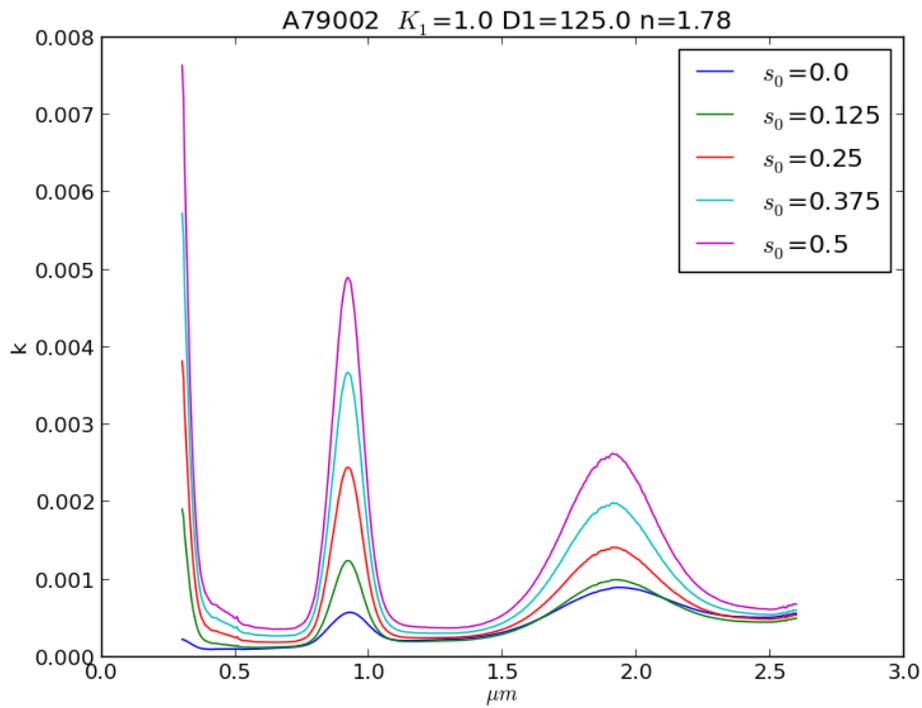


Figura 4.25: Constante ótica k em função do comprimento de onda, para cinco valores de s que são dependentes do comprimento de onda.

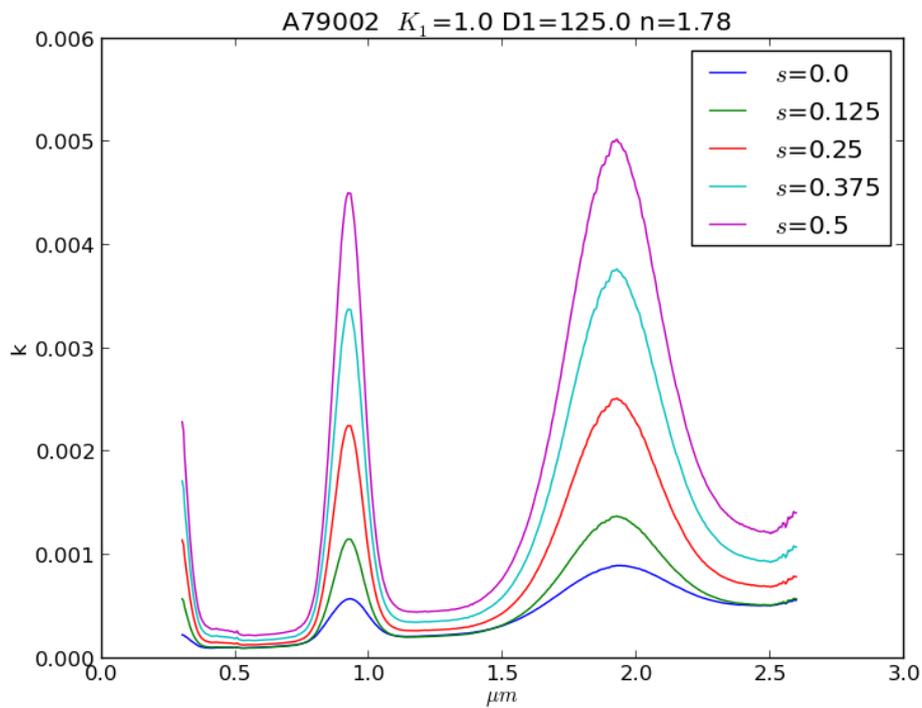


Figura 4.26: Constante ótica k em função do comprimento de onda, para cinco valores de s que não são dependentes do comprimento de onda.

Para estes testes, escolheu-se 5 amostras de espectros de meteoritos da base de dados RELAB. Três meteoritos eucritos: ALHA76005, Juvinas e Millbillillie; um meteorito diogenito: Elephant Moraine EETA79002; e um meteorito howardita: Elephant Moraine EET87503.

Dentro do modelo de Hapke, considerou-se como variáveis livres: o diâmetro efetivo D , o fator de porosidade K , o índice de refração real n , e o coeficiente de espalhamento interno em função do comprimento de onda $s_\lambda = s_0/\lambda$. Como um teste do processo de inversão escolheu-se amostra Elephant Moraine EETA79002, esta amostra apresenta 6 grupos em distribuição de tamanho de grão, que va desde $0 - 25 \mu\text{m}$ até $250 - 500 \mu\text{m}$ (ver Figura 4.18a). Inicialmente busca-se valores de D , K , n , s_0 que minimizem a métrica (Equação 4.21) entre pares de k_λ -espectros, tomando como referência o espectro CBMB67, qual tem aproximadamente uma reflectância média com respeito às outros espectros. O resultado da minimização é apresentado na Figura 2 do artigo. Como pode ser observado neste exercício, tem-se diferentes valores de D , K , n e s_0 para cada par de espectros, o que é um resultado equivalente obtido na seção anterior. Então, uma solução mais realista será que, os valores de D , K , n e s_0 determinados para um espectro também se ajustem bem para outros espectros de diferente intervalo em tamanho de grão.

$$\delta_{1,2} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [k_1(\lambda_j) - k_2(\lambda_j)]^2 \quad (4.21)$$

Para determinar soluções consistentes para k_λ , o processo de minimização é implementado de modo de obter os mesmos valores de n e s_0 para todos os espectros da amostra e valores de D e K para cada espectro. Então, para isto construiu-se uma nova métrica dada pela equação 4.22. Esta nova métrica é a soma de todos os pares dada pela métrica 4.21, normalizada pelo resíduo médio de cada par. Como tem-se varias soluções possíveis que minimizam a métrica original para cada par de espectros, se considera como fator de normalização na nova métrica o valor médio dos resíduos. Neste ponto, empregou-se um algoritmo genético para explorar de uma maneira mais abrangente o espaço de soluções.

$$\Delta = \sum_l^M \frac{\delta_{kl}}{\Gamma_{kl}} \quad (4.22)$$

A determinação de k_λ para cada amostra de meteorito se mostra na Figura 4 do artigo. As soluções obtidas aqui são para as amostras com tamanho de grão entre $25 - 250 \mu\text{m}$, tomando o primeiro espectro como referência. As variáveis n , s_0 e K são permitidas a variar

entre (1.01, 2.5), (0.0, 0.2) e (1.0, 4.0) respectivamente. Os limites permitidos de D são seus correspondentes limites de tamanho de grão.

Como pode ser observado na Figura 4 do artigo, ainda tem-se dispersão entre as constantes óticas determinadas para cada amostra de meteorito. A amostra que apresenta menor dispersão em k_λ é o meteorito eucrito Millbillillie (Figura 4d), mostrando certa dispersão em valores intermediários em comprimentos de onda. Está claro que a semelhança entre os valores de k_λ é devido a que esta amostra apresenta só três intervalos em tamanho de grão. No entanto, para os outros dois eucritos mostram maiores diferenças em k_λ com respeito ao comprimento de onda. A amostra do meteorito eucrito Allan Hills A76005, apresenta dispersão em k_λ para menores comprimentos de onda, no entanto, a amostra do meteorito eucrito Juvinas apresenta dispersão em k_λ para maiores comprimentos de onda. É possível que esta dispersão de k_λ , para diferentes regiões de comprimento de onda seja devido à diferencia entre os valores de diâmetro efetivos achados para ambas amostras. Por exemplo, a amostra Allan Hills A76005 que apresenta uma maior dispersão a menores comprimentos de onda, seus valores de diâmetro efetivo são maiores que para a amostra Juvinas, que tem uma menor dispersão a menores comprimentos de onda.

Se observamos os valores obtidos de k_λ , para estas amostras de meteoritos eucritos, poderíamos inferir que o sucesso para a amostra Millbillillie é porque esta amostra não apresenta as duas últimas distribuições de tamanho de grão. Aqui poderíamos dizer que a representação de uma distribuição de partículas por médio de um diâmetro efetivo não seja adequado para distribuições de tamanho de grão $> 150 \mu\text{m}$. Por outro lado, talvez o modelo de fator de transmissão internada, chamado de modelo de espalhamento interno usado, não seja o mais adequado para modelar as eficiências de espalhamento para partículas com diâmetro $> 150 \mu\text{m}$. Por exemplo (Hapke and Wells, 1981), encontraram um melhor ajuste para a eficiência de espalhamento para uma distribuição de partículas $> 150 \mu\text{m}$, empregando o modelo de fator de transmissão interna denominado de exponencial dupla, que têm duas variáveis livres em comparação do modelo de espalhamento interno que só tem uma. Então, se queremos maior precisão ao determinar o valor de k_λ , se poderia tentar empregar este modelo, mas o custo disto seria a adição de mais uma variável.

A amostra de meteorito diogenito Elephant Moraine A79002, os diâmetros efetivos são menores em comparação com os diâmetros para o meteorito eucrito Allan Hills A76005. Este meteorito mostra ter maior dispersão em k_λ a maiores comprimentos de onda, exceto para o primeiro espectro, que tem um diâmetro efetivo maior. Por ultimo, a amostra de meteorito howardita Elephant Moraine 87503, mostra dispersão em k_λ em todo seu comprimento de onda.

O meteorito howardita está composto por uma mistura de fragmentos de meteorito eucrito e diogenito, então, esta dispersão pode ser causada por que a proporção dos minerais eucrito e diogenito, não é igual para todos os intervalos em tamanho de grão.

As Figura 5 até 9 do artigo mostram valores das variáveis determinadas em função de seu resíduo. Os valores aceitáveis como solução são aqueles com resíduo menor a 2.9, este valor foi determinado só por inspeção visual a determinar a constante ótica k_λ . Com respeito ao índice de refração real n , se comparamos para as três amostras de meteorito eucrito, observa-se que Juvinas apresenta altos valores com respeito à literatura (Lucey, 1998). Podemos dizer que os valores achados de n não são representativos da amostra. Os valores de n para os meteoritos diogenito e howardita tem valores aceitáveis com respeito aos valores para minerais de silicato achados na literatura. Com respeito aos valores de diâmetro, pode-se observar que para as amostras com intervalo de diâmetro menor a $125 \mu\text{m}$, os valores de diâmetro que são soluções aceitáveis tende a localizasse no limite superior (ver Figuras 6, 7 e 8 do artigo), em cambio para as amostras que têm diâmetro entre $125 - 250 \mu\text{m}$ o diâmetro efetivo está aproximadamente no médio do intervalo (ver Figura 9 do artigo).

Esta preferência para valores altos e baixos de diâmetros efetivos das amostras é devido à posição respeito a espectro de referência. O espectro da amostra de referência está aproximadamente no meio de todos os espectros, isto é igual para sua constante ótica k_λ . Então, para espectros que caiam no limite superior com respeito a espectro de referência, ao momento de fazer a inversão o diâmetro efetivo tem que ser o maior possível para que sua refletância se veja diminuída e alcançar assim ao espectro de referência, o contrario acontece com espectros que caim por debaixo do espectro de referência. O comportamento da inversão em função dos parâmetros do modelo foi estudado na seção anterior. O meteorito eucrito Millbillillie é a exceção, onde seus valores de diâmetro efetivo caiam aproximadamente no meio do intervalo de tamanho de grão. A posição dos valores de diâmetro achados para esta amostra, em comparação com os valores para as outras amostras, é devido a ausência do último intervalo de diâmetro ($125 - 250 \mu\text{m}$).

Para o fator de porosidade K achado, se observa uma tendência de encontrar maiores valores de K quando o intervalo de tamanho de grão das amostras se incrementa, com exceção da amostra Juvinas que se mantém com valores baixos de K (Figuras 6, 7, 8 e 9 do artigo).

Para s_0 , os valores determinados para os meteoritos são do mesmo ordem de magnitude comparado com os valores achados na literatura (Hapke and Wells, 1981). Então, estes resul-

tados mostram que soluções achadas desta forma não são únicas, e que os parâmetros obtidos não estão necessariamente próximos dos valores reais, mas se consegue obter constantes óticas que reproduzem os espectros sobre uma faixa de diâmetros grandes. O que segue a continuação justamente é a reprodução dos espectros com os parâmetros óticos determinados.

As Figuras 10 e 11 do artigo, são as reconstruções dos espectros observados para todo o intervalo de tamanho de grão, entre 0–25 até 250–500 μm , empregando a média das constantes óticas para os meteoritos eucrito Allan Hills A76005 e diogenito Elephant Moraine EETA79002 (ver Figura 4a e 4b), respectivamente. Para efeito de comparação empregou-se dois conjuntos de parâmetros óticos (n , s_0 , k_λ): uma são as melhores valores determinados (*set1*) que apresentam o menor resíduo, e o segundo são os valores que estão afastados da melhor solução, mas ainda tem resíduo menor a 2.9 (*set2*). Então, para ajustar os espectros de refletância os valores de K e D são permitidos a variar entre 1 – 5 e 5 – 500 μm , respectivamente. Os parâmetros obtidos se mostram na Tabela 2, 3 e 4 do artigo. A Tabela 2 mostra os valores obtidos para os parâmetros óticos n e s_0 . Os subíndices $I1$ e $I2$ nos parâmetros fazem referência ao ajuste com os melhores parâmetros e ao ajuste com parâmetros que tem resíduo < 2.9 , respectivamente. Como se pode observar nesta tabela, os valores de n e s_0 são parecidos para ambos conjuntos de parâmetros óticos, exceto, claro está, para o valor de s_0 do meteorito diogenito EETA79002. A Tabela 3 mostra os valores obtidos de D e K para o meteorito eucrito Allan Hills A76005 para ambos conjuntos de parâmetros óticos. A primeira coluna são os intervalos em tamanho de grão, a segunda e terceira coluna são os melhores valores de D e K obtidos no processo de inversão do espectro de refletância. Observar que estes valores D e K são os valores presentes na Figura 4a do artigo, que justamente são as melhores soluções. Então, estes valores se podem comparar com as colunas 4 e 5 que mostram os valores de D e K obtidos do ajuste empregando os melhores parâmetros óticos, em outras palavras, os que tem menor resíduo. As colunas 6 e 7 são os valores de D e K da solução alternativa, que correspondem a valores afastados da melhor solução, mas ainda com resíduo < 2.9 . Estes valores são comparados com as colunas 8 e 9, que são os valores obtidos do ajuste empregando os parâmetros óticos alternativos, em outras palavras, afastados da melhor solução. A mesma descrição é para a Tabela 4 do artigo que corresponde ao meteorito diogenito EETA 79002.

Então, podemos observar que, ainda empregando parâmetros óticos com resíduo < 2.9 é possível reproduzir os espectros de refletância observados de forma satisfatória para intervalos em tamanho de grão entre 0 – 25 μm até 250 – 500 μm , onde as dispersões nos parâmetros D e K obtidos estão entre 30 – 50 %.

Neste ponto podemos comparar os valores de D e K determinados com os dois métodos. O primeiro é o método da Seção 2 e o segundo método, que é nossa implementação final. Na Tabela 4.5 se mostra os valores de D e K para o meteorito eucrito Allan Hills A76005, onde as colunas 1 e 2 são os valores de D e K determinados com o método inicial e, as colunas 3 e 4 são os valores determinados com o método final com os melhores parâmetros óticos que consta no artigo (Tabela 3). A Tabela 4.6 é para o meteorito diogenito Elephant Moraine EETA79002, onde a ordem das colunas são as mesmas. Pode-se observar que para o meteorito eucrito, ambos métodos mostram ter ajustes similares, sem considerar os espectros com intervalo de grão entre $0 - 25$ e $250 - 500 \mu\text{m}$. O ajuste para o primeiro método se mostra na Figura 4.10, e para o método final se mostra na Figura 10 do artigo. Comparando os valores de K obtidos por ambos métodos para o meteorito eucrito Allan Hills, os valores achados para o primeiro método são maiores que para o método final, exceto para o segundo intervalo em tamanho de grão. Para ambos métodos, se observa uma tendência a encontrar maiores valores de K quando aumenta o tamanho de grão das amostras. Comparando os valores de D temos que, os valores determinados pelo primeiro método são menores que o segundo método, exceto para os valores que correspondem aos intervalos em tamanho de grão de $75 - 125 \mu\text{m}$ e $250 - 500 \mu\text{m}$. Também se pode observar que os valores determinados de D pelo segundo método na posição do segundo e terceiro intervalo estão fora do limite da distribuição de tamanho de grão. Isto é, porque para este segundo método os limites permitidos a variar em D foi de $5 - 500 \mu\text{m}$, então, a rotina apenas procura determinar o mínimo resíduo no ajuste sem se importar com os limites permitidos para cada amostra. Para a Tabela 4.6, se mostra a mesma tendência de K a se incrementar quando aumenta o tamanho de grão. Para o primeiro método os valores de D (coluna 2) são menores que os valores dados pelo segundo método (coluna 4), exceto para o último intervalo em tamanho de grão. De novo, temos valores de D que estão fora do limite nominais, eles correspondem ao primeiro intervalo, segundo, e sexto. Neste segundo método temos melhores ajustes para as amostras de tamanho de grão entre $0 - 25 \mu\text{m}$ e $250 - 500 \mu\text{m}$ que para o primeiro método.

Tabela 4.5: Comparação entre os valores de D e K para o meteorito eucrito Allan Hills A76005.

tamanho (μm)	método inicial		método final	
	D	K	D	K
0 – 25	20.02	1.545	21	1.34
25 – 45	45.00	1.375	60	1.57
45 – 75	72.00	1.355	82	1.20
75 – 125	119.16	1.899	112	1.21
125 – 250	154.12	2.021	184	1.32
250 – 500	295.29	2.995	226	1.38

Tabela 4.6: Comparação entre os valores de D e K para o meteorito diogenito Elephant Moraine EETA79002.

Tamanho (μm)	método inicial		método final	
	D	K	D	K
0 – 25	23	1.701	26	1.29
25 – 45	45	1.403	68	1.42
45 – 75	57.22	1.672	64	1.18
75 – 125	76.37	1.655	121	1.54
125 – 250	125	2.079	198	1.92
250 – 500	250	3.211	232	1.90

O seguinte exercício é, tendo uma mistura binária entre os meteoritos eucrito Allan Hills A76005 e diogenito Elephant Moraine EETA79002, ainda é possível recuperar os valores de K , D_1 e D_2 , que sejam ainda úteis para a análise das propriedades de superfícies?. O espectro da mistura é gerado empregando os dois valores consistentes dos parâmetros óticos (n , s_0 , k_λ), com $K = 1.1$, diâmetro $D_1 = D_2 = 100 \mu\text{m}$ e mesma fração volumétrica $V_1 = V_2 = 0.5$. Os resultados se mostram na Tabela 5 do artigo. Estes valores são obtidos ajustando o modelo de refletância de Hapke ao espectro gerado pela mistura, utilizando os valores consistentes dos parâmetros óticos, onde o fator de porosidade é permitido a variar entre 1 – 3, a fração de volume V_1 entre 0 – 1 e o tamanho da partícula entre 25 – 250 μm . A coluna 1 faz referência

aos dois parâmetros óticos, o primeiro conjunto de parâmetros óticos tem menor resíduo e, o segundo conjunto são com resíduos < 2.9 . A coluna 2 é o valor de entrada de K e os valores obtidos, a coluna 3 e 4 mostra os valores de entrada de D e os valores obtidos e, a coluna 5 mostra o valor de entrada de V e os valores obtidos. O resultado mais importante é que ainda é possível obter resultados aceitáveis da mistura (D_1 , D_2 e K) empregando conjuntos de parâmetros óticos que estão afastados da melhor solução.

3.1 Artigo: Numerical determination of visible/NIR optical constants from laboratory spectra of meteorites

Numerical determination of visible/NIR optical constants from laboratory spectra of meteorites

Jorge A. G. Davalos^a, Jorge Márcio Carvano^a, Julio Blanco^b

^a*Observatório Nacional, rua Gal. José Cristino 77, São Cristóvão, 20921-400, Rio de Janeiro, Brazil*

^b*Observatorio Astronómico del Instituto de Profesores Artigas, Avenida del Libertador 2025, Montevideo, Uruguay*

Abstract

In this work we analyze the problem of retrieving optical constants of materials from reflectance spectra of particulate samples through the numeric inversion of Hapke radiative transfer models. Our main driver is the existence in public databases of a large quantity of reflectance spectra of meteorites and minerals that however lack adequate sample characterization. The main goal is to devise a method that can be used to that end, and then assess whether a unique, physically realistic solution can be obtained in this way and, if not, how useful the solutions obtained can still be to the problem of constraining the composition of Solar System bodies. The overall result is that, without tight *a priori* constraints of the possible values, the acceptable solutions are not unique, with good solutions scattered within $\approx 30\%$ of the best solutions. Also, it is not clear whether the actual physical solutions would always be inside the set of the parameters spanned by the acceptable solutions. Even so, the optical parameters retrieved in this way are able to reproduce the reflectance spectra of the samples over a broad range of particle sizes, and can be useful in the study of the composition of Solar System bodies in instances where errors of 30% or larger in the derived equivalent particle sizes and porosities can be tolerated.

Keywords: optical constants, meteorites, asteroids.

1. Introduction

The remote determination of the composition of Solar System bodies depends on the existence of laboratory measurements of the spectra of minerals

and meteorites. These spectra can be then used to constrain the composition of those bodies in several different ways, each with its own advantages and pitfalls: direct comparison, spectral parametrization/modelization, and radiative transfer models (Gaffey et al., 2002; Reddy et al., 2015).

Direct comparison or curve matching is the easiest to use, and is useful to assess similarities and suggest possible analogs. Problems with this approach are that the shape of the spectra also depend on the texture of the sample and on the geometry of the measurements, and that the spectra of airless bodies can be affected by space weathering effects (Gaffey et al., 2002).

The parametrization of spectra of mineral end-members is made through the quantification of spectral characteristics that can be used as diagnostic of composition and is most useful for spectra dominated by Olivine/ Pyroxene bands. Parameters and calibrations derived in this way are, to some extent, unaffected by geometry, texture, or space weathering (Cloutis and Gaffey, 1991; Gaffey et al., 2002; Reddy et al., 2015; Ruesch et al., 2015). The application of the method is straightforward if the observed spectra has sufficient overlap to the spectra used to derive the calibrations. This method however is of limited, if any, use for assemblages whose spectra is not characterized by the presence of absorption bands, and is incapable of estimating the contribution of components with featureless spectrum. To address the issue of mixtures of end-members it is necessary to measure the spectra of a suitable amount of carefully prepared samples that span the range of possible mixing fractions.

Similarly, constraints and calibrations derived from laboratory measurement of mineral end-members are needed in order to apply the Modified Gaussian Model (Sunshine and Pieters, 1993; Clenet et al., 2013) to the spectra of Solar System objects, which attempts to model absorption bands in reflectance spectra as the sum of Gaussian features plus a linear continuum that is linear in energy. Here laboratory spectra are used to constrain the parameters of the Gaussians used to describe the bands of each end-member. This method can in principle handle mixtures of an arbitrary number of end-members without the need of dedicated measurements of laboratory-prepared mixed samples, but in practice the uniqueness of the solutions derived is not guaranteed. The method is also of limited use for materials whose spectra is not dominated by absorption bands, and also cannot constrain the presence of featureless components in the spectra.

In all those methods the measured spectra are used directly, which means that constraints obtained refer explicitly, to some degree, to the geometry and

the texture (whether the sample was a slab or particulate, grain size ranges, etc) of each measurement. That is not the case of radiative transfer models in soils (the most used variety of which being the Hapke models) which can in principle handle mixtures of an arbitrary number of end-members, provide constraints to the presence of spectrally neutral mineral phases, and simulate almost any observational geometry and surface textures, as well as model the effects of space weathering (Hapke et al., 2009; Pieters et al., 2000). This type of method can also be used to assess the composition of bodies with surfaces dominated by materials whose spectrum does not present conspicuous spectral absorptions, as well as to constrain the presence of such materials in mixtures. One caveat with this kind of methods is that in order to obtain an unique solution for a set of presumed end-members it in general requires, besides a spectrum, additional information about the object like geometric albedo or measurements at different observational geometries, since the number of parameter and their functional dependence in the models can result on non-unique solutions (Baratoux et al., 2006).

Other major issue here is that these methods need as input the spectra of the optical constants of the end-members, which have in turn to be derived from their reflectance spectra. This is a problem since the determination of optical constants from reflectance spectra is not straightforward and presents several difficulties. One first decision to be made here is on what radiative transfer model to use, with Shkuratov (Shkuratov et al., 2005) and Hapke models being the ones most commonly used in the literature. Hapke models in particular have been evolving over the years to incorporate effects like opposition surge, macroscopic roughness and porosity of the particulate sample. For Hapke models it is also necessary to choose a model to calculate the single scatter albedo from the optical constants. The measured spectrum depends therefore on several parameters concerning the texture of the sample and the geometry of the measurement. Ideally, the number of free parameters can be reduced by an adequate choice of the measurement geometry, and by a careful determination of the particle size distribution and the porosity of the sample. An independent determination of the real part of the optical constants in at least one wavelength is also necessary.

At this point there is a large number of spectra of minerals and meteorites in public databases. The majority of these however lack adequate determination of particle size, of the refractive index, or porosity. In this work we investigate the problem of retrieving the optical constants in the absence of adequate sample characterization. The goal here is to devise a method that

can be used to that end, and then assess whether a unique, physically realistic solution can be obtained in this way and, if not, how useful the solutions obtained can still be to the problem of constraining the composition of Solar System bodies. In section 2 we discuss the reflectance model adopted and its hypothesis; In section 3 we present a sample of 5 meteorites, each with spectra of sample separates within several diameter ranges, that will be used to test the inversion methods and perform an initial inversion test. A thorough exploration of parameter space is performed in section 4 in order to assess the existence of unique solutions, and additional tests to determine to which extent the possible solutions can be used in the study of solar system bodies are also presented. A summary of the findings and conclusions are presented in section 5.

2. Reflectance models

The problem is to obtain the the optical constants of a given material from the bi-directional reflectance spectra of samples of that material which have been crushed and then sieved, so that each sample is composed of particles whose characteristic sizes are distributed within given size limits.

We are particularly interested here in measurements in the visible to near-infrared range obtained by the .. instrument at RELAB. These measurements are in fact radiance factors and can be modeled using Hapke's more recent formulation as (Hapke, 1984, 2002, 2008):

$$r_\lambda = \frac{w_\lambda}{4} \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} K [p(g)B_{SH}(g) + M(w_\lambda, \mu_0, \mu)] B_{CB}(g)S(\bar{\theta}, \psi, \mu_0, \mu) \quad (1)$$

In this equation the geometry of the observation is described by the cosines of the incidence and emergence angles, μ_0 and μ , and by the phase angle g (and these three angles in turn set the azimuth angle ψ). The expression depends on the optical properties of the medium (which in turn depends on the wavelength of the incident light) mostly through the mean volumetric single scatter albedo w_λ (on which the multiple scattering function M depends) and the coefficients in the volumetric phase function $p(g)$, but the way the particles are packed in the surface can also have considerable effect on the measured values of r_λ . These effects are incorporated in the expression through the functions K , B_{SH} , B_{CB} and S . The correction for porosity effects is given by the porosity factor K (Hapke, 2008):

$$K = -\frac{\ln(1 - EL)}{EL^{2/3}} \quad (2)$$

$$EL = 1.209 \left(\frac{D_\sigma}{D_v} \phi \right)^{2/3} \quad (3)$$

where ϕ is the filling factor, defined as the fraction of the volume of the medium that is occupied by the particles, D_σ is the diameter of a sphere with the same cross-section area σ of the particle and D_v the diameter of the sphere with same volume as the particle.

The opposition effect, an increase in brightness at low phase angles caused by the presence of voids in the surface, is modeled by the shadow-hiding function B_{SH} and by the coherent back-scatter function B_{CB} (Hapke, 2002):

$$B_{SH} = 1 + B_{S0} \left[1 + \frac{1}{h_S} \tan(g/2) \right]^{-1} \quad (4)$$

$$B_{CB} = 1 + B_{C0} \frac{1 + \frac{1 - e^{(1/h_C) \tan(g/2)}}{(1/h_C) \tan(g/2)}}{2 [1 + (1/h_C) \tan(g/2)]^2} \quad (5)$$

where h_S and h_C are the angular width of the effects and B_{S0} and B_{C0} their amplitude.

Finally, the effects of the macroscopic roughness of the surface are incorporated into the model by the shadowing function S , whose value depends on the geometry of the observation and on the mean slope angle of the surface, $\bar{\theta}$ (Hapke, 1984). Therefore, besides the optical properties of the material, the radiance factor needs, to be fully specified in the general case, 6 parameters related to the texture of the sample, which in general are not known. The number of the unknowns can however be reduced by selecting measurements with suitable experimental geometry, since both the opposition effects and the shadowing function are highly dependent on the phase angle. On one hand, for typical values of h_S, h_C both opposition functions tend to unity at phase angles sufficiently away from opposition ($g = 0^\circ$).

On the other, the shadowing function S depends only on $\bar{\theta}$ and on the geometry of the observation, and affects the reflectance as a multiplicative factor < 1.0 that does not depend on the wavelength. In contrast, the factor K that corrects for porosity appears as a multiplicative factor > 1.0 that also does not depend on wavelength, but its effect on the reflectance will also

depend on the albedo through the multi-scattering term M or alternatively through the Chandrasekar function (see below). Considering that including both effects could make the numerical inversion of the reflectance unstable and add an extra degree of liberty to the problem we choose not to consider the macroscopic roughness correction. Therefore, since for phase angles $> 20^\circ$ the opposition effects can be ignored, the expression for the radiance factor is reduced to :

$$r_\lambda = \frac{w_\lambda}{4} \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} K [p(g) + M(w_\lambda, \mu_0, \mu)] \quad (6)$$

In this expression the only effect related to the texture of the sample left is the porosity, which can be described either by the filling factor ϕ or directly by the porosity factor K .

By its turn, the single scatter albedo w_λ is determined by the size, shape and optical properties of the particle. Assuming homogeneous spherical particles, the single scatter albedo of a particle of a given diameter D can be calculated from the complex optical constants of the material using Mie Theory (ignoring diffraction). If the particle is much larger than the wavelength of the incident radiation, the scattering efficiencies of the particle can be calculating analytically using geometrical optics through the equivalent slab approximation. This formulation, can be extended to model the scattering efficiencies of non-homogeneous, irregular (but equant) particles. Using a model of equivalent slab with internal scatters (Hapke, 2012b) we have for the scattering efficiency of a particle:

$$w \approx Q_s = S_e + (1 - S_e) \frac{1 - S_i}{1 - S_i \Theta} \Theta \quad (7)$$

where

$$S_e = 0.0587 + 0.8543R(0) + 0.0870R(0)^2 \quad (8)$$

$$S_i = 1 - \frac{1}{n^2} [0.9413 - 0.8543R(0) - 0.0870R(0)^2] \quad (9)$$

$$R(0) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (10)$$

$$\Theta = \frac{r_i + \exp(-\sqrt{\alpha(\alpha + s)}\langle D \rangle)}{1 + r_i \exp(-\sqrt{\alpha(\alpha + s)}\langle D \rangle)} \quad (11)$$

$$\langle D \rangle = \frac{2}{3} \left[n^2 - \frac{1}{n} (n^2 - 1)^{3/2} \right] D \quad (12)$$

$$\alpha = 4\pi k / \lambda \quad (13)$$

$$r_i = \frac{1 - \sqrt{\alpha/(\alpha + s)}}{1 + \sqrt{\alpha/(\alpha + s)}} \quad (14)$$

Here D is the diameter of the spherical particle with same efficiency as the particle in question, n and k are the real and imaginary parts of the optical constants and s is the internal scattering coefficient of the material.

The phase function is also dependent on the optical properties of the particles. A convenient choice for the functional form of the phase function is a double-lobed Henyey-Greenstein function (Hapke, 2012b)

$$p(g) = \frac{1 + c}{2} \frac{1 - b^2}{(1 - 2b \cos g + b^2)^{3/2}} + \frac{1 - c}{2} \frac{1 - b^2}{(1 + 2b \cos g + b^2)^{3/2}} \quad (15)$$

Experimental works show that the parameters b and c are related to the optical properties of the materials, and also that they follow an empirical relation (Hapke, 2012a):

$$b = \left[\frac{1}{17.4} \ln \left(\frac{3.29}{0.908 + c} \right) \right]^{1/2} \quad (16)$$

Also, the coefficient c can be derived from D , s , k and n using the equivalent slab model (Hapke, 2012b):

$$c = \frac{\Delta Q_s}{Q_s} \quad (17)$$

where

$$\Delta Q_s = S_e + (1 - S_e) \frac{1 - S_i}{1 - S_i \Psi} \Psi \quad (18)$$

$$\Psi = \frac{r_i - \exp(-\sqrt{\alpha/(\alpha + s)}\langle D \rangle)}{1 - r_i \exp(-\sqrt{\alpha/(\alpha + s)}\langle D \rangle)} \quad (19)$$

If the medium is composed of particles made of a single material but with a continuous size distribution where $N_D dD$ is the total number of particles with characteristic diameter between D and $D + dD$ per unit volume, the single scattering albedo of the medium is

$$w \approx \frac{\int N_D \sigma_D Q_{s_D} dD}{\int N_D dD} \quad (20)$$

In this case the volume and cross-section of the particles would similarly be replaced by their averages in the medium.

Therefore, if opposition and macroscopic roughness effects can be ignored, the radiance factor of a sample can be written as

$$r_\lambda = r(D, K, s_\lambda, n_\lambda, k_\lambda, \lambda) \quad (21)$$

Here D is now the effective diameter of the particles in the sample, which depends on their size distribution. In this expression we also write explicitly the optical constants and the internal scattering coefficient as functions of the wavelength. The real and imaginary parts of the optical constants are further related by the Kramers-Kronig dispersion relations (Roush, 2003):

$$n_\lambda = n_{\lambda_0} + \frac{2(\lambda^2 - \lambda_0^2)}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\lambda'^2 k_{\lambda'}}{(\lambda^2 - \lambda'^2)(\lambda_0^2 - \lambda'^2)} d \ln \lambda' \quad (22)$$

where P denotes the Cauchy principal value of the integral and n_{λ_0} is an independently determined value of n at λ_0 .

However, in the wavelength range that interest us here the variations of the real part of the optical constants tend to be small, and as a first approximation n is usually considered as a constant (Hapke and Wells, 1981; Hapke, 2012b), $n_\lambda = n$. Also, since s was only measured for a very restricted number of materials, this parameter is also usually set to a constant value $s_\lambda = s$ (Hapke and Wells, 1981). Here we consider, as a better approximation, an internal scattering coefficient with the same dependence on wavelength as the absorption coefficient α :

$$s_\lambda = \frac{s_0}{\lambda} \quad (23)$$

With these hypothesis, we have then

$$r_\lambda = r(D, K, s_0, n, k_\lambda, \lambda) \quad (24)$$

Therefore, if for a given sample the values of \bar{D}, K, s_0 , and n were known, it would then be possible to use the above expression to numerically derive values of k_λ for each measured value of r_λ . A final step here is to substitute the computationally expensive multi-scattering function M by the simpler analytical approximation IMSA (Hapke, 2002, 2012b):

$$r(D, K, s_0, n, k_\lambda, \lambda) = \frac{w_\lambda}{4} \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} K [p(g) + H(\mu_0)H(\mu) - 1] \quad (25)$$

where

$$H(x) = \frac{1 + 2x/K}{1 + 2\gamma x/K} \quad (26)$$

$$\gamma = \sqrt{1 - w_\lambda} \quad (27)$$

We can now define for each measured spectrum of reflectance factors a function $k_i(\lambda)$ that satisfies the equation

$$r_{i_\lambda} - r(D_i, K_i, s_0, n, k_\lambda, \lambda) = 0 \quad (28)$$

With this model we can then obtain the imaginary part of the optical constants from measured radiance factors.

The problem with this approach is that, in general, not all of the 4 parameters needed for obtaining k_λ from r_λ are known for the samples with measured reflectance factors. Indeed, for most samples none of them are known at all. Previous works aiming to derive optical constants from laboratory spectra dealt with this difficulty by making informed guesses about the values of the unknown parameters. Also, most of those works were made before the importance of the porosity correction had been established in the literature, while others also assumed values for the coefficients of the phase function. And since expressions like Eq. 2 can be successfully inverted for a broad range of values of the input parameters, the values of k_λ obtained in this way, although consistent with the hypothesis adopted by the authors, are not necessarily close to the real values.

A way to ensure that the obtained optical constants are closer to their real values is to demand that the obtained values fit equally well spectra of the same material obtained from samples of particles with different sizes. Approaches like this were used by several authors (Lucey, 1998; Roush, 2003; Carli et al., 2014) to improve the fit for multiple spectra by adjusting the values of effective diameters of each sample used in the inversions. The problems we will address in the next sections are: 1) given the radiance factor spectra of a material obtained for several different size ranges, is it possible to find for each spectra a set of parameters that result in the same set of k_λ ; and 2) if yes, is this solution unique?

3. Test sample and numeric inversion methods

The requirement for spectra selections, according to the discussion in the previous sections, concerns mostly the geometry of the measurements and sample preparation procedures. We are interested in bi-directional reflectance measurements obtained with phase angles between 20° and 60° , of particulate samples that have been sorted according to particle size.

In this paper we use as test cases the spectra of four HED meteorites measured by T. Hiroi at the RELAB facility (Pieters and Hiroi, 2004). This sample includes the Antarctic finds Alan Hills A7006, Elephant Moraine EETA79002, Elephant Moraine EET87503, as well as the falls Millbillillie and Juvinas. The meteorites A76005, Juvinas and Millbillillie are classified as Eucrites, while EETA79002 is a Diogenite and EET87503 is a Howardite.

All samples were crushed and sieved into several particle size intervals. All spectra were obtained using the RELAB Bidirectional Spectrometer with the same experimental geometry: emergence angle of 0° , and incidence and phase angle of 30° . Table 1 lists the RELAB identification ID of all spectra and their corresponding meteorite and size range, and all spectra are shown in Fig. 1.

We selected for initial tests the spectra of the meteorite Elephant Moraine A79002. The spectra for all samples of this meteorite are shown in Fig. ???. As the grain size is increased the reflectance falls and the reflectance gradient measured across the first band goes progressively from positive to negative. Each sample is characterized by a specific effective diameter D and porosity factor K , and we assume that n , s_0 and k_λ should be the same for all.

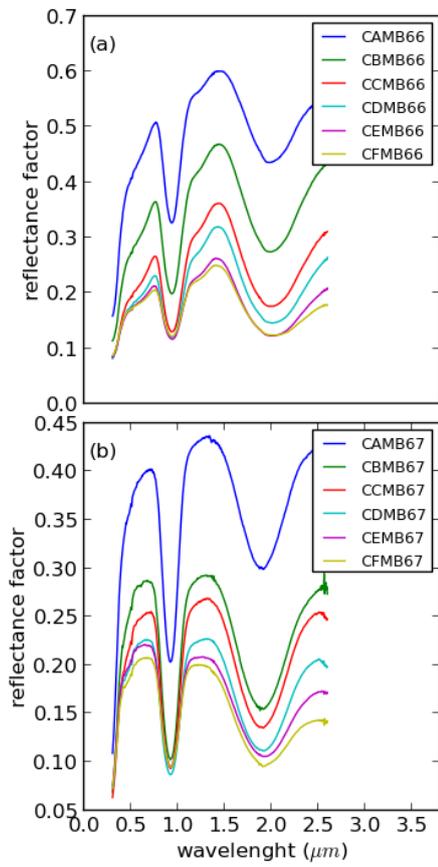
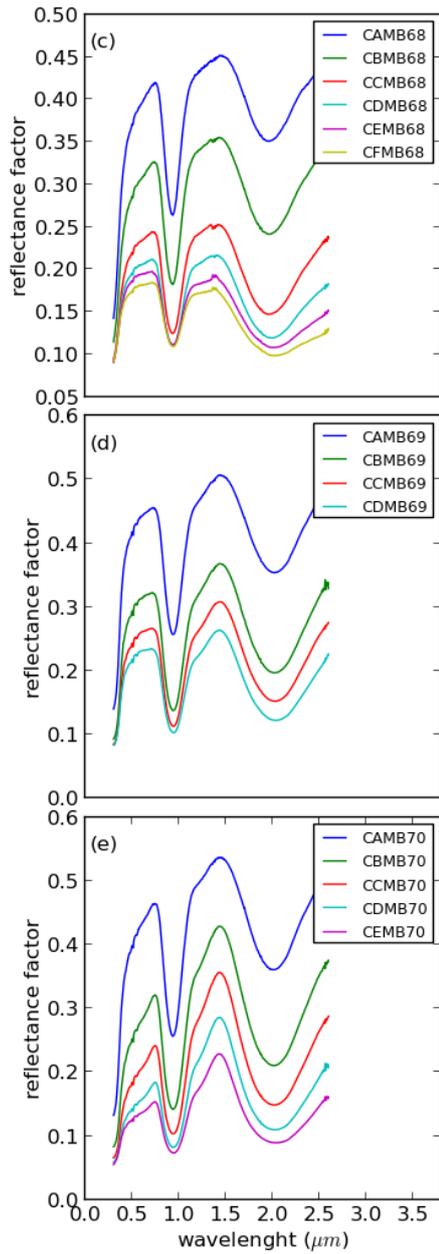


Figure 1: Reflectance spectra of all samples with size range between 0 – 500 μm of the meteorites used in this work: (a) A76005; (b) EETA79002; (c) EET87503; (d) Millbillillie; (e) Juvinas



12
Figure 1 (cont.)

A76005	EETA79002	EET87503	Millbillillie	Juvinas	size range (μm)
CAMB66	CAMB67	CAMB68	CAMB69	CAMB70	0-25
CBMB66	CBMB67	CBMB68	CBMB69	CBMB70	25-45
CCMB66	CCMB67	CCMB68	CCMB69	CCMB70	45-75
CDMB66	CDMB67	CDMB68	CDMB69	CDMB70	75-125
CEMB66	CEMB67	CEMB68	-	CEMB70	125-250
CFMB66	CFMB67	CFMB68	-	CFMB70	250-500

Table 1: RELAB samples of the meteorite spectra used in this work

A first step is to determine whether we can obtain, for any given pairs of spectra, a set of parameters s_0 , n , D_1 , K_1 , D_2 , K_2 that minimizes the difference between $k_1(\lambda)$ and $k_2(\lambda)$ over a range of wavelengths. For that we need to define a metric that measures this difference in a convenient way. We use a standard euclidean metric

$$\delta_{12} = \frac{1}{N} \sum_j^N [k_1(\lambda_j) - k_2(\lambda_j)]^2 \quad (29)$$

However, instead of calculating δ over the entire spectrum we do so over only 5 chosen control points which correspond to the center of the bands and to point in the continuum before and after each band. This is done in order to minimize the number of evaluations of the metric and to speed up the computations.

This metric can then be used in conjunction with minimization algorithms to search for the set of parameters that produce the best matching $k(\lambda)$ for any two spectra. In order to characterize the goodness of fit that could be achieved for different size ranges we used the python/scipy implementation of the nelder-mead simplex minimization algorithm (Nelder and Mead, 1967) to look for solutions involving the sample CBMB67 (with particle diameters between 25 – 45 μm) and all other samples. We chose this size range as reference since its reflectance spectra lies in the middle of the range spanned by the other samples. In these minimization runs the diameters of the particles were forced to be within the ranges of each sample, and several tests with different limits for the other parameters and different initial guesses were performed. Examples of the k_λ spectra obtained for the different pairs of samples are shown in Figure 2. One first result of this exercise is that for any two pairs of reflectance spectra there are multiple sets of parameters that

will yield matching k_λ spectra. Other result is that the degree of similarity of the k_λ for different samples changes depending of the samples involved. Very good fits can be obtained for any combination of the samples CBMB67, CCMB67, and CDMB67, which only diverge at the longer wavelengths. The same goes for fits involving these samples and CEBM67, except that the divergence tends to be visible at shorter wavelengths. In contrast, fits involving the sample CAMB67 tend to be systematically bad in the region of smaller wavelengths. Finally, no real good fits can be found when comparing the sample CFMB67 with any of the others.

The mismatch at shorter wavelengths between CAMB67 and the other samples could be explained considering that this sample is composed by small particles, since we are using geometrical optics to relate the optical constants with the albedo and this approximation is only valid if the particles are large compared to the wavelength. For the other samples, the agreement between the obtained k_λ gets worse as the difference in particle size between samples increase, culminating in the absence of good matches for CFMB67. One possible explanation for the mismatch is that the range of sizes in this sample is much larger than the previous ones and it is not clear if it could be adequately by one equivalent diameter.

One final thing that becomes evident is that the matches between CBMB67 and the other samples presented in Figure 2 have in general very different values of n and s_0 and for D and K for that sample. A solution that is at least physically consistent on the other hand would be one in which the same values of D , K , n and s_0 for an sample can fit equally well the spectra of all other size ranges. In the next section we will use the samples CBMB67, CCMB67, CDMB67, and CEMB67, for which good matches can be found, to map the solution space searching for consistent solutions.

4. Finding consistent solutions

In order to constrain the values of n and s_0 of the material and of D and K for each sample for which consistent solutions for k_λ can be found we conducted a numerical search for values of n , s_0 , D_1 , D_2 , K_1 , K_2 that minimizes the metric describe in eq. 29 for a given pair of spectra, for all combinations of the spectra of the samples CBMB67, CCMB67, CDMB67, and CEMB67. To explore more efficiently the phase space, the minimization was performed using a genetic algorithm set to operate in deterministic crowding mode. Genetic algorithms are numerical search procedures that

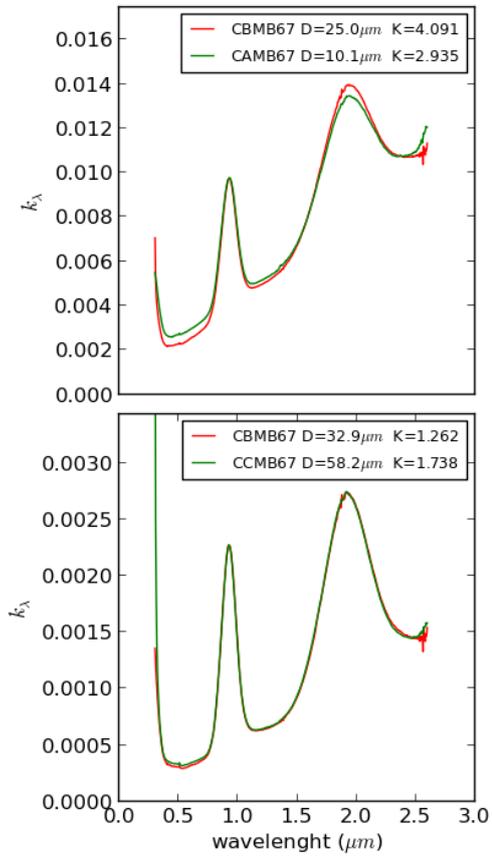
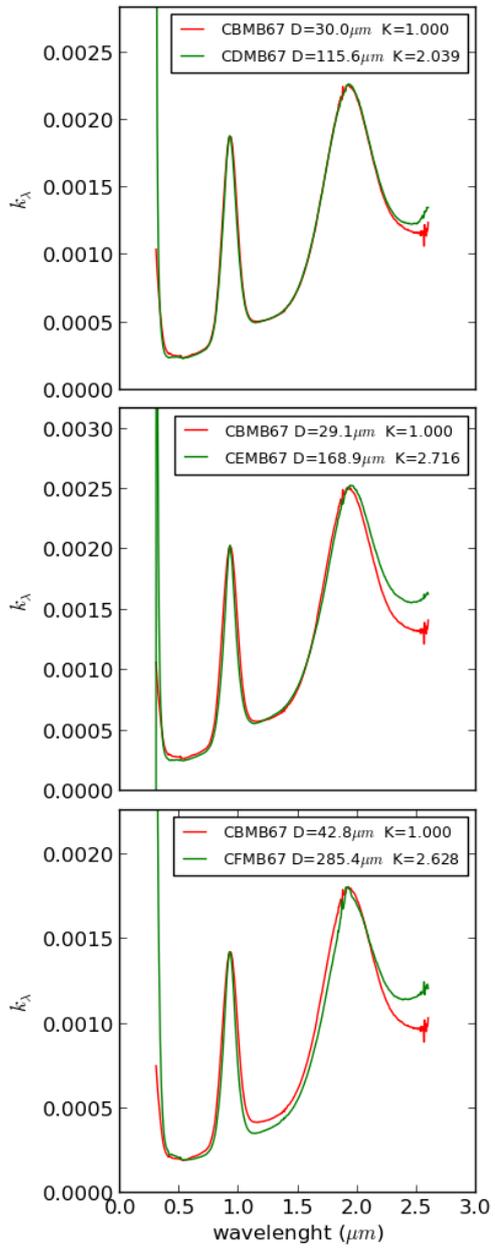


Figure 2: k_λ spectra of the example of best fit solutions obtained with a simplistic minimization routine for pairs of samples of the meteorite EETA79002, using the sample CBMB67 as reference



16
Figure 2 (cont.)

emulate genetic and evolutionary principles (Goldberg, 1989), where a initial population (with each individual defined by a set of the parameters) suffers mutations (random changes in the parameters) and recombinations (exchange of parameters between individuals) and are then ranked according to some metric. At the end of one of such iteration only the fittest individuals are selected to be spawned into the next generation, and after a number of generations the fittest solution tends to dominate the final population. A careful choice of the mutation, recombination and selection strategies can however set the algorithm to operate in deterministic crowding mode, in which many different fit solutions are preserved during the evolution, allowing the simultaneous determination of the location of the good solutions in the phase space (Mahfoud, 1995).

We used a custom deterministic crowding algorithm (Carvano et al., 2008) based on the GALib library. For each pair of spectra we defined a population of 400 individuals and allowed it to evolve over 400 generations. During the minimization the values of each parameter were constrained within fixed limits. The limits for n , s_0 and the values of K for both samples were set to (1.01, 2.5), (0.0, 0.2), and (1.0, 4.0), respectively, while the limits for D are the size range of each sample. Figure 3 shows the scatter of n as a function of the residuals left after minimization for each pair of spectra. It is clear from this Figure that each pair of spectra has a characteristic residual, and that for each there are multiple sets of parameters that yield solutions. Not all solutions in the last generation are actually good fits, so they were sorted according to their residual and visually inspected to determine the maximum value of the residual for which acceptable solutions could still be found.

Using these results we conducted a search for solutions that are consistent with all size ranges. To do so we defined one of the spectra as reference and calculated the metric described in the previous section, between this reference spectra and all other spectra. The final metric was then calculated as the sum of Eq. 29 for each pair of spectra normalized by the median residual Γ_{jk} for each of the M pairs:

$$\Delta = \sum_l^M \frac{\delta_{kl}}{\Gamma_{kl}} \quad (30)$$

We then use this metric as the objective function of the same deterministic crowding algorithm described previously to find the parameters that yield consistent solutions for k_λ for all 5 meteorites listed in Table 1. Here we

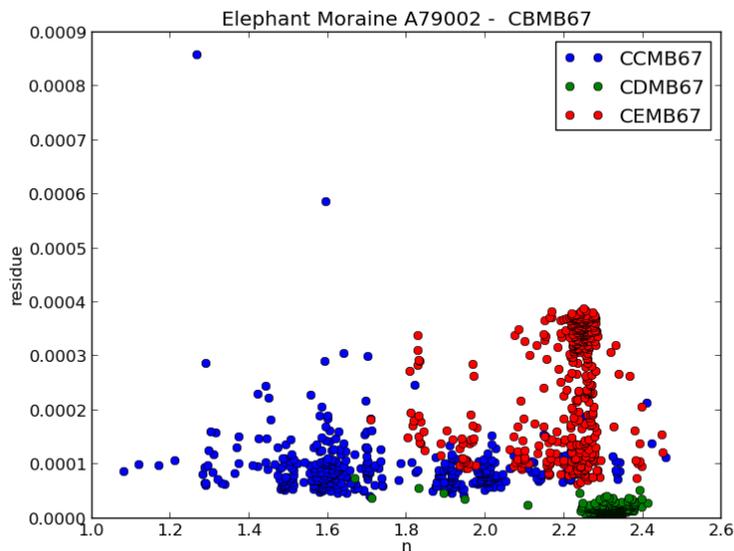


Figure 3: Scatter plot of n as function of the residual for pairs of spectra of the meteorite EETA79002 with size ranges from 25 to 250 μm .

used only spectra obtained from sample with size ranges between 25 and 250 μm , and adopted the spectra of the first size range as reference. For each meteorite, the median residuals for each pairs were calculated as the median of the residuals of the acceptable solutions found in a previous run fitting pairs of spectra from different size ranges individually, and the intervals in which each parameter was allowed to vary were the same as in the previous run. Considering that we have now a much larger parameter space to explore, these searches for consistent solutions were run with a population of 1600 individuals for 800 generations for each meteorite.

Figure 4 shows the k_λ spectra derived from each size range for best fit solutions for each meteorite. Ideally, for each meteorite the same k_λ spectrum should be retrieved from the spectra of samples of all size ranges. In practice, although this method produced in general very good agreement between the k_λ spectra from different size ranges for four of the meteorites (A76005, EETA79002, Millbillillie, and Juvinas), the results for EET87503 are clearly not as good. Even for the these four meteorites the quality of the agreement is not homogeneous throughout the wavelength range. For A76005 all fits are

very good inside both absorption bands but the spectrum from the 25–45 μm range diverges slightly from the others in the region between the bands, and all four size ranges diverge slightly at lower wavelengths. The agreement between all size ranges for EETA79002 is very good up to 2 μm , where the spectrum of the 125–250 μm size range diverge from the others and the other size ranges start to diverge slightly from one another. For Juvinas, we have a very good agreement in the region of the first band and on lower wavelengths, but there is a slight divergence of the spectrum of the 25–45 μm range in the region between the bands and at very low wavelengths, and the four ranges also start to diverge slightly from one another after 2 μm . The best overall agreement was obtained for Millbillillie, but this fit only involved three size ranges, from 25 – 45 μm to 75 – 125 μm .

It must be said at this point that the degree of overlap observed between k_λ obtained from spectra of different size ranges with the adopted algorithm seems to be better than or at least comparable to what is seen in other works that perform similar exercises (Lucey, 1998; Roush, 2003; Carli et al., 2014), which were made with different minimization algorithms and different versions of Hapke’s model. The fact that the solutions obtained here, although very good, do show some discrepancies must be related to limitations of the approximation involved in the model, inadequacies of one or more of its hypothesis, or to issues with the measurement/sample preparation of one or more of the spectra involved in the minimization. A conceivable problem here would be a variation of overall composition of the samples induced by the sieving used to segregate each size range. This in fact is a possible explanation for the relative failure for EET87503, which is a Howardite and therefore composed of a brecciated mixture of Eucrite and Dionenite grains.

Also, the fact that the best result obtained here – for the meteorite Millbillillie – do not involve the 125 – 250 μm size range and the fact that we were unable to find for EETA79002 a k_λ spectrum that could equally match the 250 – 500 μm range and any other size range could again be an indication that to use a equivalent diameter to approximate a distribution of diameters becomes an issue as the range of diameters involved becomes larger.

Other questions that must be addressed are whether the fitted parameters are within the range of values that can be considered physically realistic, and how unique are the solutions obtained. The values for best fit solutions are presented on Figure 4, and Figures 5 to 9 show the all the scatter of all fitted parameters with respect to the residual of the solutions. As before, not all solutions that remain till the end of the evolution provide acceptable

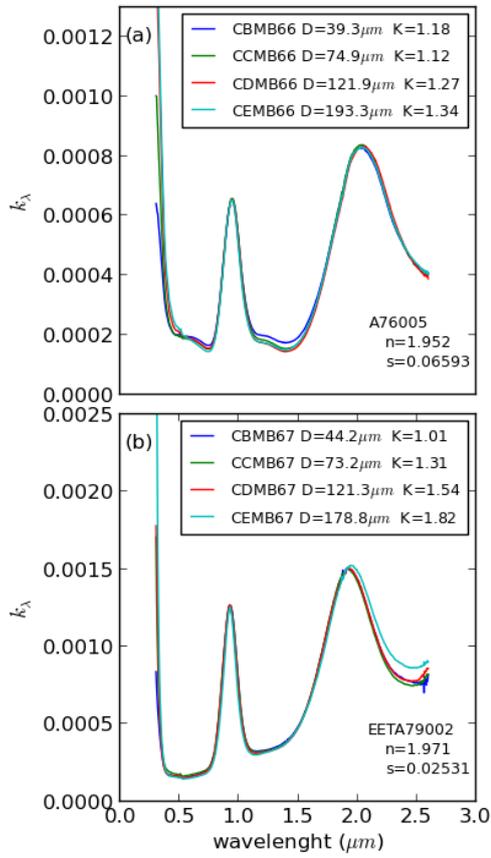
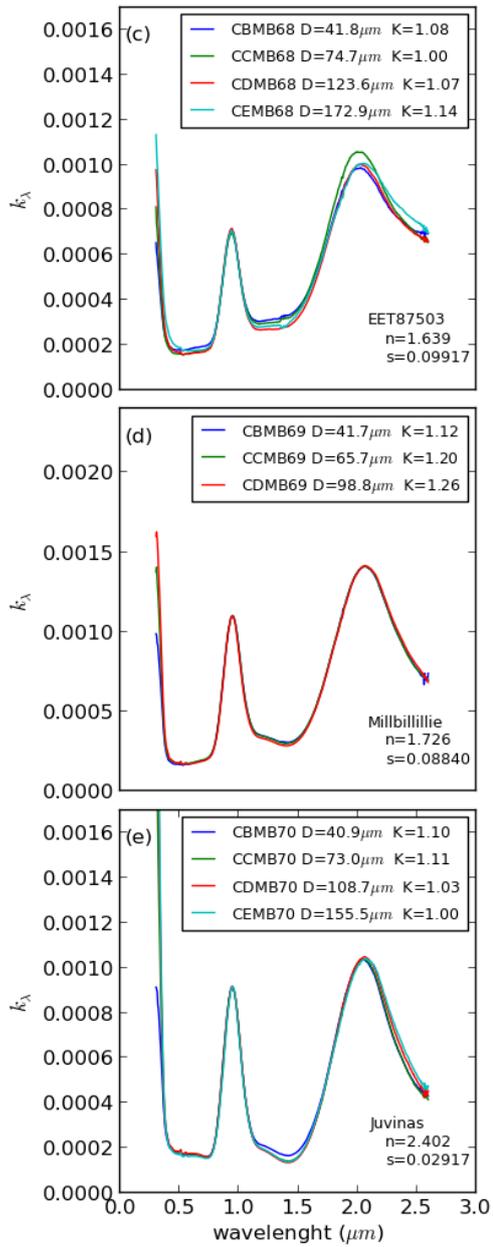


Figure 4: k_λ spectra obtained for each size range for the best fit solutions for the meteorites: (a) A76005; (b) EETA79002; (c) EET87503; (d) Millbillillie and (e) Juvinas



21
 Figure 4 (cont.)

fits. Visual inspection of the resulting k_λ spectra suggests that solutions with residues < 2.9 can be accepted, which are shown in red in those Figures. For the real part of the refractive index n , although there is no comprehensive compilation of measurement of this quantity for HED meteorites, the best solutions for A76005, EETA79002, and Juvinas seem to be higher than the expected values for pyroxenes (Lucey, 1998), which are the major mineral phase in this type of meteorites. The distribution of the best solutions for these meteorites (Fig. 5) show that acceptable solutions that are within the listed values for pyroxenes can be found for A76005 and EETA79002, but not for Juvinas. For s_0 there are no direct measurements in the literature except for measurements of synthetic glasses that yield $s = 0.06 \mu m^{-1}$ at visible wavelengths (Hapke and Wells), which are of comparable order of magnitude of the fitted values for s_0 , whose best solutions are in the 0.02–0.1 range. The distribution of solutions for D and K in each size range for all meteorites are shown in Figures 6 to 9. For D it would be expected that the effective diameter of the grains were close to the average value for each size interval (35,60,100, and 187.5 μm). Instead the best fit solutions in the first size range for all meteorites is concentrated around the upper end. This also happens for the next two size ranges for all meteorites except Millbillillie, whose best solutions are closer to the average. Only in the last size range all solutions tend to be distributed around the average value, but with the distribution for Juvinas being skewed toward values smaller than the average. Concerning K , the least constrained parameter which is most affected for the details of sample preparation, all that can be said is that the retrieved values are within the theoretical range, with a trend of larger K (which translates as smaller filling factors) with larger equivalent diameters; the exception here being Juvinas.

Therefore, the overall result is that, without tight *a priori* constraints of the possible values, the acceptable solutions for the fitted parameters are not unique, with good solutions scattered within $\approx 30\%$ of the best solutions. Also, it is not clear whether the actual physical solutions would always be inside the set of the parameters spanned by the acceptable solutions, since these not always match our expectations in terms of values of n and of the distribution of grain diameter in the samples. In terms both of n and diameters, results that more closely follow the expectations were obtained only for Millbillillie, for which a spectrum in the 125–250 μm size range was not available. This may again suggest that the approximation of the size distribution of that last size range by a single effective diameter may be problematic, and

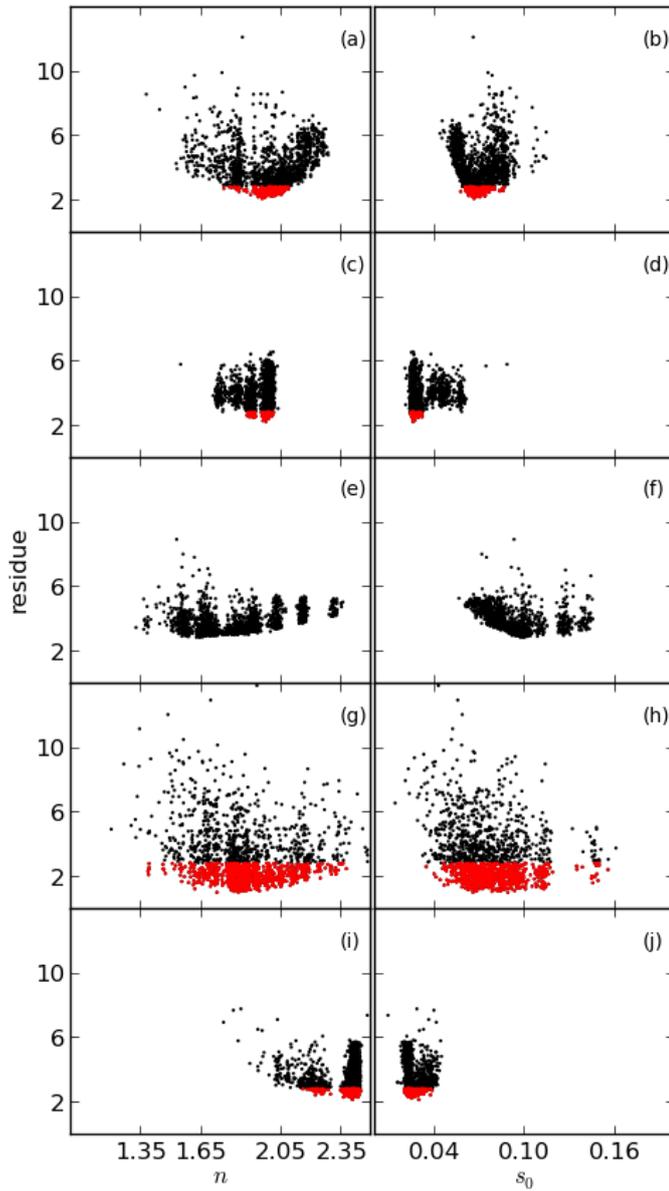


Figure 5: Residuals as function of n and s_0 at the end of the minimization process for the meteorites: A76005 (a) and (b); EETA79002 (c) and (d); EET87503 (e) and (f); Millbillilie (g) and (h); Juvinas (i) and (j). The solutions deemed acceptable are shown in red.

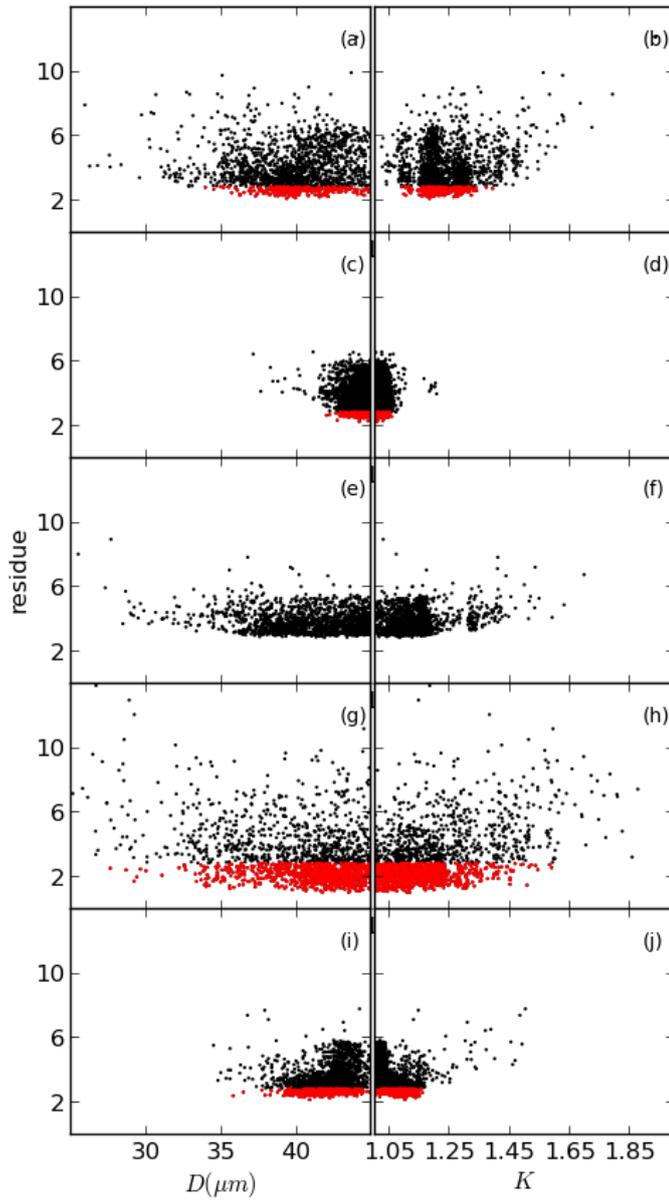


Figure 6: Same as Fig. 5 for the Diameters and K for the $25 - 25 \mu m$ size range

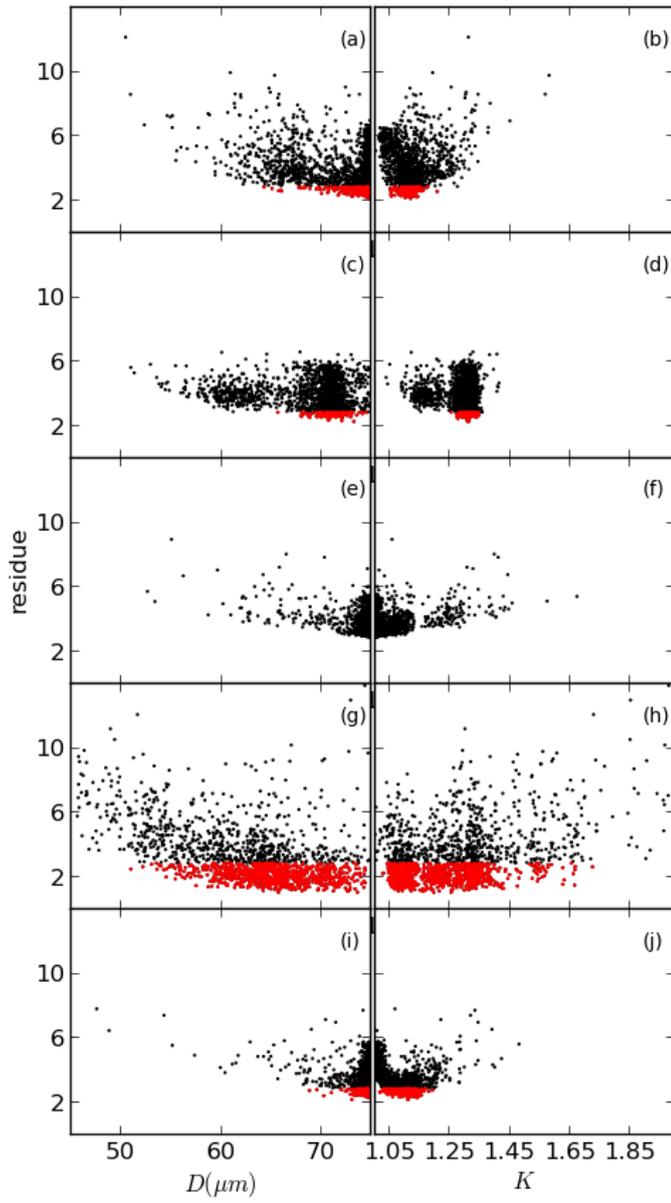


Figure 7: Same as Fig. 6 for the $45 - 75 \mu\text{m}$ size range.

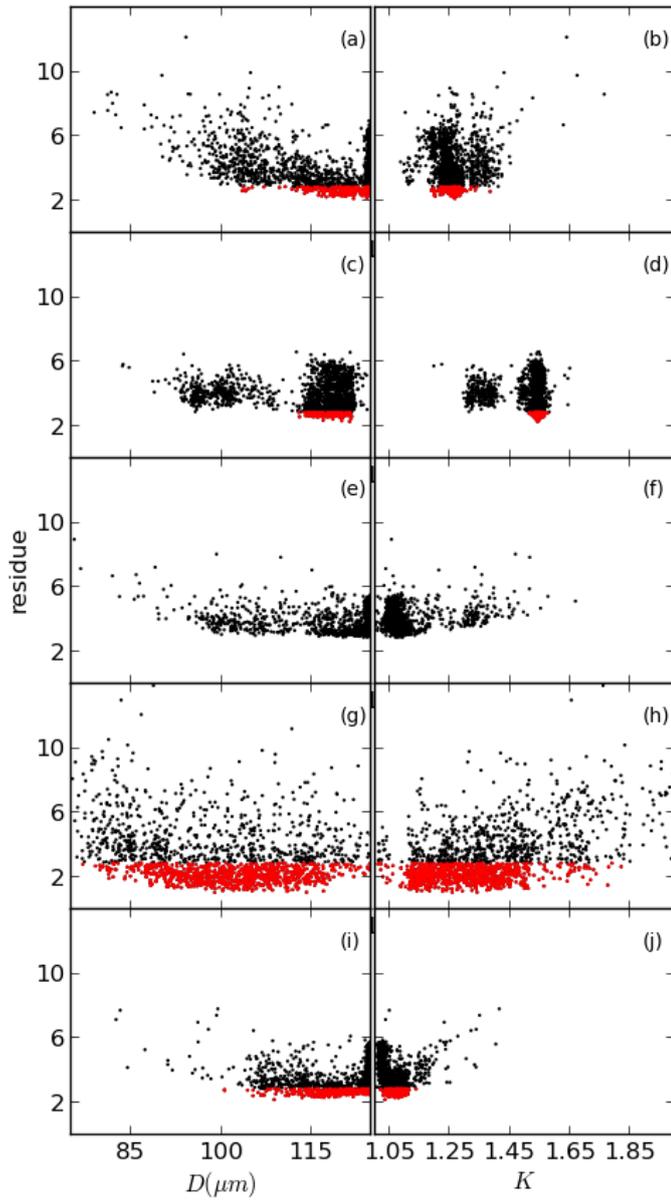


Figure 8: Same as Fig. 6 for the $75 - 125 \mu m$ size range.

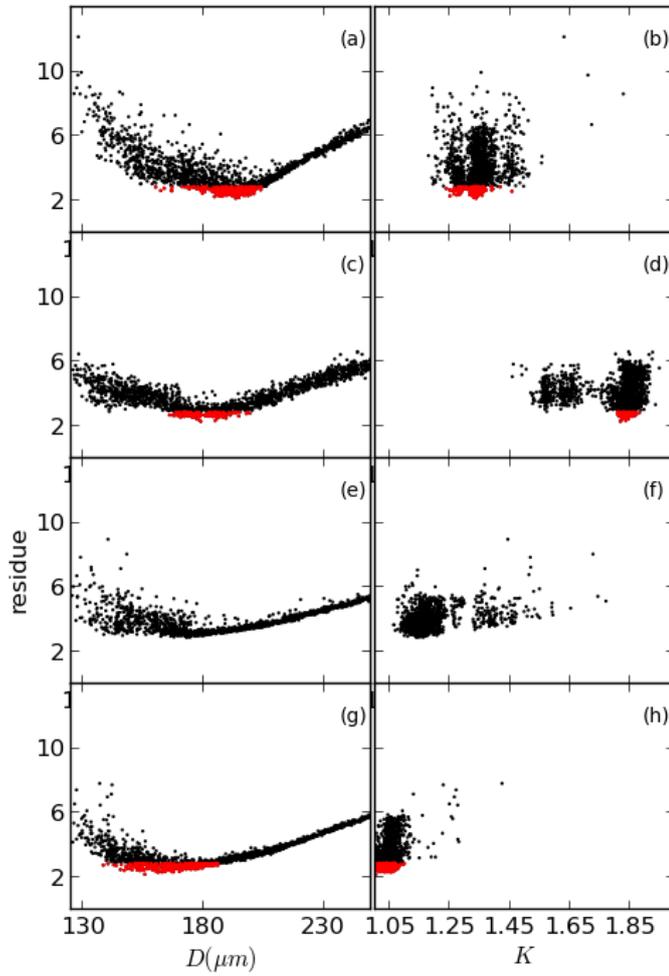


Figure 9: Same as Fig. 6 for the $125 - 250 \mu m$ size range for the meteorites: A76005 (a) and (b); EETA79002 (c) and (d); EET87503 (e) and (f); Juvinas (g) and (h).

therefore forcing our global solution to also fit a spectrum in this range may be shifting the distribution of the fitted parameters away from their physical values.

In the end, however, the final objective of this kind of exercise is to obtain for a given meteorite/mineral a set of optical parameters n , s_0 , and k_λ than can be used in conjunction with models to retrieve useful information about the physical composition of the surface of asteroids or planets. The results obtained with the methodology presented here, even if not necessarily close to the real, physical values of those quantities, are able to reproduce the spectral behavior of the materials over a large range of effective diameters. The price to pay for using these 'consistent' set of optical constants instead of the real values is to accept the possibility of large errors for the retrieved values of the effective diameters and porosity factors. A conservative estimate based on the scatter of the values in Figure 6 to 9 suggests possible errors around 30% in effective diameter and 30% in K . One additional question here is if the use of such set of consistent optical parameters instead of the real values would also allow us to place useful constraints on the volumetric fraction of each end-member in mixtures.

In order to test this we first produced a set of consistent k_λ spectra for A76005 and EETA79002 by averaging the values obtained for the four size ranges used in the minimization process. In order to assess how well the resulting optical parameters can fit the spectra of different size ranges we then used the set of optical parameters obtained for the best fit solution (set 1) and other obtained from a solution with residue < 2.9 and which in terms of the fitted parameters is far from the best solution (set 2). In this exercise we used as metric

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (r_{i_\lambda} - r(D_i, K_i, s_0, n, k_\lambda, \lambda))^2 \quad (31)$$

where N is the number of points of the spectrum, and the differential evolution optimization routine from the *python scipy.optimize* module. During the fitting process the values of D were constrained to be between 5 and 500 μm , and K constrained between 1 and 5, for all spectra. Figures 10 and 11 shows the best fit solutions for D and K for size ranges from 0 – 25 μm to 250 – 500 μm for both meteorites. Table 2 compares the the values of n and s_0 obtained for the two different solutions, while Tables 3 and 4 shows the values of D and K obtained for each size range during the inversion process

meteorite	n_{I1}	s_{0I1}	n_{I2}	s_{0I2}
EETA79002	1.97	0.025	1.75	0.057
A76005	1.95	0.066	2.01	0.075

Table 2: n and s_0 for the meteorites A76005 and EETA79002 for the best fit solution (I1) and an alternative solution (I2)

size range (μm)	D_{I1}	K_{I1}	D_{F1}	K_{F1}	D_{I2}	K_{I2}	D_{F1}	K_{F2}
0-25	-	-	21	1.34	-	-	18	1.36
25-45	39	1.18	60	1.57	34	1.21	51	1.56
45-75	75	1.12	82	1.20	66	1.13	70	1.19
75-125	122	1.26	112	1.21	103	1.25	96	1.21
125-250	193	1.34	184	1.32	166	1.33	160	1.31
250-500	-	-	226	1.38	-	-	196	1.37

Table 3: Fitted values for D and K in all size ranges for the meteorite A76005. Values subscripted with 'I' are derived from the inversion used to obtain k_λ , while the subscript 'F' marks the values obtained by fitting the averaged k_λ . Solution '1' is the best fit solution from the inversion and '2' is an alternative solution.

for each solution and the values resulting from the fit with the averaged k_λ .

From Figures 10 and 11 it is possible to see that both solutions provide very good fits (with residues smaller than 5%) for both meteorites within almost the whole spectral range, for the size ranges used in the inversion process – panels (b) to (e) in those Figures. Even for particles with diameters in the ranges 0 – 25 μm (panels (a)) and 250 – 500 μm (panels (f)) the models for A76005 are within 5% of the measurements for most of the spectral range, while for EETA79002 the models for those size ranges have residues smaller than 10% for most of the spectra. Therefore, we can indeed expect that consistent solution for n , k_λ and s_0 will be able to reproduce the reflectance of materials over a broad range of particle diameters. However, a look at the

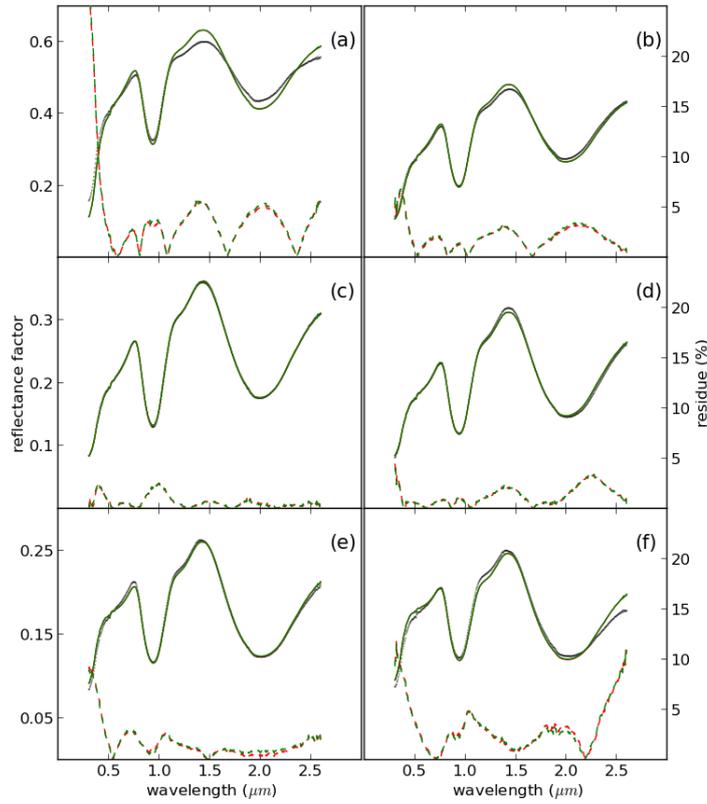


Figure 10: Fitted spectra for each size range (solid lines) for A76005 for the best fit solution (red) and alternative solution (green). The percentual residue between the model and measured spectra for each solutions is shown in dotted lines. The labels (a) to (f) correspond, respectively, to the size ranges from $0 - 25 \mu m$ to $250 - 500 \mu m$.

size range (μm)	D_{I1}	K_{I1}	D_{F1}	K_{F1}	D_{I2}	K_{I2}	D_{F1}	K_{F2}
0-25	-	-	26	1.29	-	-	24	1.25
25-45	44	1.01	68	1.42	45	1.02	62	1.36
45-75	73	1.31	64	1.18	61	1.15	55	1.06
75-125	121	1.54	121	1.54	96	1.31	94	1.31
125-250	178	1.82	198	1.92	141	1.57	147	1.58
250-500	-	-	232	1.90	-	-	174	1.56

Table 4: Same as Table 3, for the meteorite EETA79002

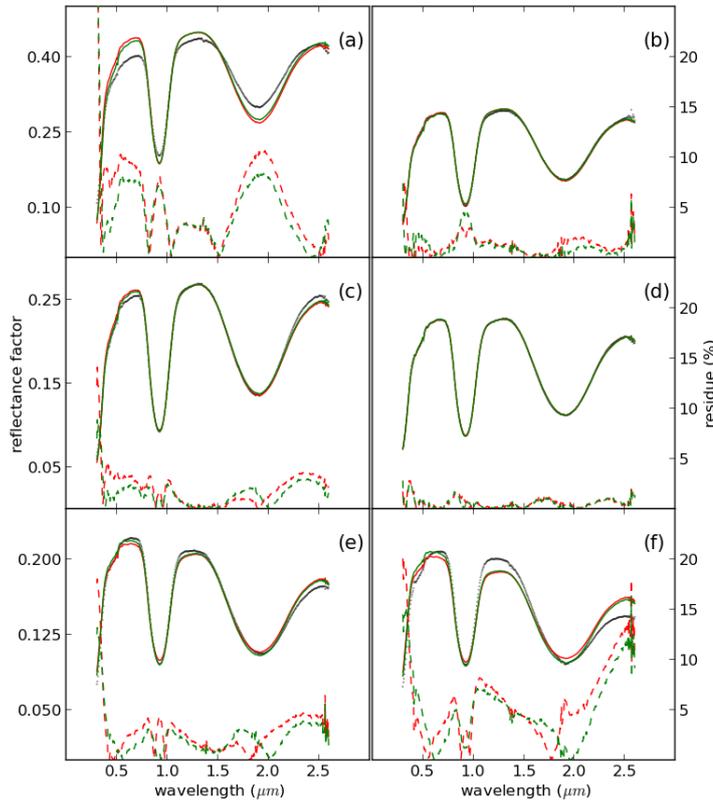


Figure 11: Same as Figure 10 for the meteorite EETA79002

retrieved values for D and K in Tables 3 and 4 reinforces the notion that the errors in those parameters can be considerable ($\approx 30 - 50\%$), to the point that the fitted values for D in the size ranges $25 - 45$ and $250 - 500 \mu m$ are outside the nominal diameter range.

To better understand to what extent useful constraints on the volumetric fractions in mixtures can be obtained with these consistent optical parameters we then consider binary intimate mixtures of A76005 (met. 1) and EETA79002 (met. 2), where the resulting single scatter albedo and phase function are given by (Hapke)

$$w = \frac{\sum_j^2 V_j \pi D_j^2 w_j}{\sum_j^2 V_j \pi D_j^2} \quad (32)$$

$$p(g) = \frac{\sum_j^2 V_j \pi D_j^2 w_j p_j(g)}{\sum_j^2 V_j \pi D_j^2 w_j} \quad (33)$$

where V_j is the volumetric fraction of each end-member and the w_j and c of each end-member are given by equations (7) and (17). We use the best fit optical parameters to produce a target spectra with $K = 1.1$, $D_1 = D_2 = 100 \mu m$, and $V_1 = V_2 = 0.5$, and then attempt to fit K , D_1 , D_2 , and V_1 ($V_2 = 1. - V_1$) using the optical parameters for the best fit solution and also for the alternative solution. In this test K is allowed to vary between 1 and 3, V_1 between 0 and 1 and the diameters between 25 and $250 \mu m$. Here again we use the deterministic crowding genetic algorithm described in section 3 in order to assess the existence of multiple solutions. The results for populations of 600 individuals after 800 generations are shown in Figure 12 and the best fit values are listed in Table 5. From both it is possible to see that the solution using as end-members the same optical constants converges towards the right solution. In comparison, the solution that uses a different set of consistent optical constants tends to values of D_1 , D_2 , and K that are offset from the correct ones, but still manages to get very close to the right value of V_1 . All considered, this suggests that it is still possible to retrieve useful constraints about the components of the mixture even using as input a different set of consistent optical parameters.

	K	D_1	D_2	V_1
Target	1.10	100	100	0.50
Fit #1	1.11	95	105	0.55
Fit #2	1.01	86	81	0.47

Table 5

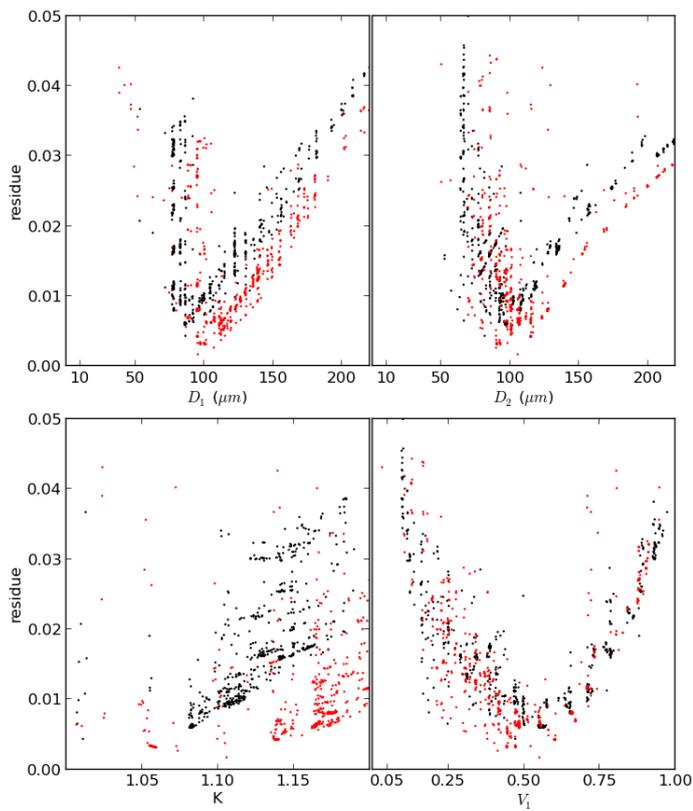


Figure 12: Distribution of residues for D_1 , D_2 , K , and V_1 for the attempts to retrieve the parameters from a binary mixture. The attempt #1 that uses the same optical parameters used to make the target spectrum are shown in red, while the attempt #2, which uses a different set of optical parameters are shown in black.

5. Summary and Conclusions

In this work we have analyzed the problem of retrieving optical constants of materials from reflectance spectra of particulate samples through the numeric inversion of Hapke radiative transfer models. Our main driver is the existence in public databases of a large quantity of reflectance spectra of meteorites and minerals that however lack adequate characterization in terms of particle size distribution, surface porosity, and visible refraction index. The main question we sought to answer is if despite this lack of characterization is it still possible to obtain optical constants that could be useful in the remote determination of surface properties of airless bodies. To this end we adopted a Hapke model corrected for porosity through the porosity factor K but not considering opposition or macroscopic roughness effects, applied to spectra observed with phase and azimuth angles such that those effects could be ignored. We used an double-lobed Henyey-Greensten function to describe phase effects, whose two coefficients were connected by a empirical relation and used a geometrical optics approximation to relate the single scatter albedo and phase coefficient to the particle diameter, wavelength of incident radiation and optical constants n and k of the material; the model adopted here was an equivalent slab with internal scatterers, whose properties were described by an internal scatter coefficient which we assumed to be inversely proportional to the wavelength and proportional to a value s_0 . We also assumed that the optical properties of a soil with a distribution of particle sizes could be represented by a single equivalent diameter, and that the real part of refractive index n is not dependent on wavelength from the visible to the NIR. The resulting model calculates the reflectance spectra of surface given its porosity factor K , effective particle diameter D , internal scatter coefficient s_0 , real refractive index n , and the spectra of the imaginary part of the refractive index k_λ , in a way that the model could be inverted to yield k_λ given the reflectance spectra and the other parameters. We applied that model to the spectra of five HED meteorites measured at the RELAB facility (three eucrites, a diogenite and a howardite) that were grounded and sieved into six particle size ranges, from 0 – 25 to 125 – 250 μm . Assuming that the composition of the samples of each meteorite were the same on all size ranges we then used numerical minimization routines to seek the value of the model parameters that would minimize the difference in the k_λ obtained from reflectance spectra of two or more size ranges. We used in particular a custom genetic algorithm set to preserve and refine the multiple good solu-

tions found during the minimization process. The main results obtained can be summarized as follows:

- The k_λ spectra obtained from the $0 - 25 \mu m$ interval presented large differences with respect to the same quantity derived from all other size ranges; the same was observed for the $250 - 500 \mu m$ size range
- The k_λ spectra derived from the simultaneous minimization of the reflectance spectra of the intermediate size ranges in general presented excellent agreement to one another and an averaged k_λ is able to fit with residues smaller than 5% the spectra of particles in that size range, and with residues smaller than 10% the spectra of smaller or larger particles.
- The solutions obtained were not unique, with the values of the parameters of acceptable solutions distributed within 30% of the values of the best fit solutions. It is also not possible to guarantee that the best fit solutions obtained are in the vicinity of the real, physical values of the optical parameters that describe the material.
- An attempt to fit a binary intimate mixture using optical parameters of the end-members that were different from the ones used to generate the spectra was able to retrieve values of the porosity factor of the surface and effective diameters and volumetric fractions of the end-member that, although offset from the nominal values, were still sufficiently close to be considered useful.

Assuming that the adopted model provides a reasonable physical description of the process of light scattering in the samples, it would be expected that the real, physical values of the retrieved parameters would be in a close vicinity of the best fit solution. The difficulties we have in finding solutions for both the smallest and largest particle size ranges point to issues with some of hypothesis used in this work that may be offsetting the results.

The problems at the smallest particle diameters is most likely due to the limitations of the geometrical optics approximation used, which is only valid for particles much larger than the wavelength of the incident radiation. This issue could be solved by using Mie theory to calculate the single scatter albedo and phase function, but this would make the inversion process more computationally expensive. Considering the difficulty in obtaining k_λ that

could fit the spectra of particles in the $250 - 500 \mu\text{m}$ range as well as the other size ranges, a tentative hypothesis is that this may be happening because the use of a single effective diameter to represent the size of the particles in the sample ceases to be a valid approximation as the interval of particle sizes in the sample becomes larger. If that is the case, and if this issue also affects to a minor degree the $125 - 250 \mu\text{m}$ size range, it is possible that the inclusion of spectra of this size range in the minimization process may be offsetting the resulting parameters from their physical values. A possible evidence of that is the fact that results from the Millbillillie that were obtained without that size range have parameters that most closely match our *a priori* expectations concerning values of n and effective diameters. One possible solution here would be to explicitly consider a size distribution when computing the single scatter albedo and phase function, but this presents several difficulties, since it would also make the inversion process more computationally intensive and would introduce more free parameters to be fit. Other solution would be simply not to use the $125 - 250 \mu\text{m}$ range in the inversion, but we do not think that this is advisable at this point. For one side, it is not clear if in fact the results obtained for Millbillillie are indeed closer to the physical values of the parameters since we do not have a direct determination of n for any of the meteorites analyzed, and the presence of oblong particles can offset the particle size distributions beyond the nominal range of the sieves used in the sample preparation. For the other, the inclusion of the $125 - 250 \mu\text{m}$ whenever possible ensures that the derived optical parameters will be able to reproduce the measured reflectance spectra over a larger range of particle sizes.

In the end, the inversion procedure presented here can, in the absence of any *a priori* knowledge about the physical properties of materials and samples, make use of library spectra of minerals and meteorites to derive a set of optical parameters that are consistent in the sense of being able to yield reflectance spectra that can reproduce measurements over a broad range of particle sizes. These consistent optical parameters can be derived for a large portion of the meteorites with spectra already in public databases, and may be useful in the study of the composition of Solar System bodies in instances where errors of 30% or larger in the derived equivalent particle sizes and porosities can be tolerated.

References

- Baratoux, D., Pinet, P. C., Kaydash, V. G., Shkuratov, Y., Daydou, Y., Besse, S., Jehl, A., Chevrel, S., Mar. 2006. The Derivation of Hapke Parameters Using Multi-Angular Observations from Orbit and Laboratory: An Ill-posed Problem. In: Mackwell, S., Stansbery, E. (Eds.), 37th Annual Lunar and Planetary Science Conference. Vol. 37 of Lunar and Planetary Inst. Technical Report.
- Carli, C., Roush, T., Capaccioni, F., Mar. 2014. Retrieving Optical Constants and Grain Size of Glasses by Hapke Modeling. In: Lunar and Planetary Science Conference. Vol. 45 of Lunar and Planetary Inst. Technical Report. p. 1840.
- Carvano, J. M., Barucci, M. A., Delbó, M., Fornasier, S., Lowry, S., Fitzsimmons, A., Feb. 2008. Surface properties of Rosetta's targets (21) Lutetia and (2867) Steins from ESO observations. *A&A*479, 241–248.
- Clenet, H., Pinet, P., Ceuleneer, G., Daydou, Y., Heuripeau, F., Rosemberg, C., Bibring, J.-P., Bellucci, G., Altieri, F., Gondet, B., Aug. 2013. A systematic mapping procedure based on the Modified Gaussian Model to characterize magmatic units from olivine/pyroxenes mixtures: Application to the Syrtis Major volcanic shield on Mars. *Journal of Geophysical Research (Planets)* 118, 1632–1655.
- Cloutis, E. A., Gaffey, M. J., Apr. 1991. Spectral-compositional variations in the constituent minerals of mafic and ultramafic assemblages and remote sensing implications. *Earth Moon and Planets* 53, 11–53.
- Gaffey, M. J., Cloutis, E. A., Kelley, M. S., Reed, K. L., 2002. Mineralogy of Asteroids. *Asteroids III*, 183–204.
- Goldberg, D. E., 1989. Genetic algorithms in search, optimization and machine learning.
- Hapke, B., Jul. 1984. Bidirectional reflectance spectroscopy. III - Correction for macroscopic roughness. *Icarus*59, 41–59.
- Hapke, B., Jun. 2002. Bidirectional Reflectance Spectroscopy. 5. The Coherent Backscatter Opposition Effect and Anisotropic Scattering. *Icarus*157, 523–534.

- Hapke, B., Jun. 2008. Bidirectional reflectance spectroscopy. 6. Effects of porosity. *Icarus*195, 918–926.
- Hapke, B., Nov. 2012a. Bidirectional reflectance spectroscopy 7. The single particle phase function hockey stick relation. *Icarus*221, 1079–1083.
- Hapke, B., 2012b. Theory of reflectance and emittance spectroscopy, 2nd edition.
- Hapke, B., Wells, E., Apr. 1981. Bidirectional reflectance spectroscopy. II - Experiments and observations. *J. Geophys. Res.*86, 3055–3060.
- Hapke, B. W., Shepard, M. K., Nelson, R. M., Smythe, W. D., Piatek, J. L., Jan. 2009. A quantitative test of the ability of models based on the equation of radiative transfer to predict the bidirectional reflectance of a well-characterized medium. *Icarus*199, 210–218.
- Lucey, P. G., Jan. 1998. Model near-infrared optical constants of olivine and pyroxene as a function of iron content. *J. Geophys. Res.*103, 1703.
- Mahfoud, S. W. ., 1995. Niching Methods for Genetic Algorithms. Ph.D. thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana.
- Nelder, J. A., Mead, R., Jan. 1967. A Simplex Method for Function Minimization. *Computer Journal* 77, 308–313.
- Pieters, C. M., Hiroi, T., Mar. 2004. RELAB (Reflectance Experiment Laboratory): A NASA Multiuser Spectroscopy Facility. In: Mackwell, S., Stansbery, E. (Eds.), *Lunar and Planetary Science Conference*. Vol. 35 of *Lunar and Planetary Inst. Technical Report*.
- Pieters, C. M., Taylor, L. A., Noble, S. K., Keller, L. P., Hapke, B., Morris, R. V., Allen, C. C., McKay, D. S., Wentworth, S., Sep. 2000. Space weathering on airless bodies: Resolving a mystery with lunar samples. *Meteoritics and Planetary Science* 35, 1101–1107.
- Reddy, V., Dunn, T. L., Thomas, C. A., Moskovitz, N. A., Burbine, T. H., Feb. 2015. Mineralogy and Surface Composition of Asteroids. ArXiv e-prints.
- Roush, T. L., Mar. 2003. Estimated optical constants of the Tagish Lake meteorite. *Meteoritics and Planetary Science* 38, 419–426.

- Ruesch, O., Hiesinger, H., Cloutis, E., Le Corre, L., Kallisch, J., Mann, P., Markus, K., Metzler, K., Nathues, A., Reddy, V., Sep. 2015. Near infrared spectroscopy of HED meteorites: Effects of viewing geometry and compositional variations. *Icarus*258, 384–401.
- Shkuratov, Y. G., Stankevich, D. G., Petrov, D. V., Pinet, P. C., Cord, A. M., Daydou, Y. H., Chevrel, S. D., Jan. 2005. Interpreting photometry of regolith-like surfaces with different topographies: shadowing and multiple scattering. *Icarus*173, 3–15.
- Sunshine, J. M., Pieters, C. M., May 1993. Estimating modal abundances from the spectra of natural and laboratory pyroxene mixtures using the modified Gaussian model. *J. Geophys. Res.*98, 9075–9087.

Capítulo 5

Efeitos de forma sobre parâmetros empíricos

O modelo de refletância bidirecional de Hapke considera um meio plano semi-infinito, onde o tamanho das partículas é muito maior que o comprimento de onda da radiação incidente. Então, este meio está mais em acordo com amostras de minerais preparadas no laboratório, especialmente para amostras que são pulverizadas e tamisadas. O objetivo deste capítulo é determinar diferenças entre os parâmetros espectrais para um espectro gerado considerando uma geometria plano-paralelo e outro espectro considerando uma geometria elipsoidal. Para gerar espectros sintéticos empregou-se as constantes óticas médias determinadas no capítulo 4. O ponto de partida é o uso de uma forma muito simples, um elipsoide formado por facetas triangulares lisas, onde cada faceta contribui à refletância integrada total. Comparamos os parâmetros espectrais dos espectros sintéticos considerando o efeito de forma, como: a inclinação do espectro (*slope*), centro das bandas de absorção e o BAR (Area da Banda-II/Area da Banda-I), para visar diferenças com respeito os parâmetros determinados dos espectros sintéticos sem levar em conta o efeito de forma.

A geometria do elipsoide depende dos valores dos eixos a_1 , a_2 e a_3 . Para simular a rotação do elipsoide considera-se dois sistemas de coordenadas: i) um sistema de referência fixo no elipsoide que tem por eixo Z o eixo de rotação, e o eixo X como a origem de longitude e, ii) um sistema que contém a direção do observador e a fonte, onde o eixo x está na direção do observador. Então, é possível calcular os novos vetores direção da fonte e observador quando o sistema faz uma rotação ao redor do eixo Z, tendo os vetores direção iniciais do observador e a fonte e uma fase inicial de rotação que usualmente é fixado a zero. Portanto, com respeito

ao observador se simula a rotação do elipsoide calculando as facetas que são visíveis e/ou iluminadas. Facetas que tenham produto interno negativo não são consideradas no cálculo da refletância total, onde o co-seno do ângulo é determinado em relação à direção do vetor normal a cada faceta, e o vetor na direção à fonte ou observador. Na Figura 5.1 mostra-se um elipsoide onde seu eixo de rotação (polo de rotação) tem por aspecto um ângulo de 30° e obliquidade 30° e, o elipsoide apresenta uma fase de rotação de 60° .

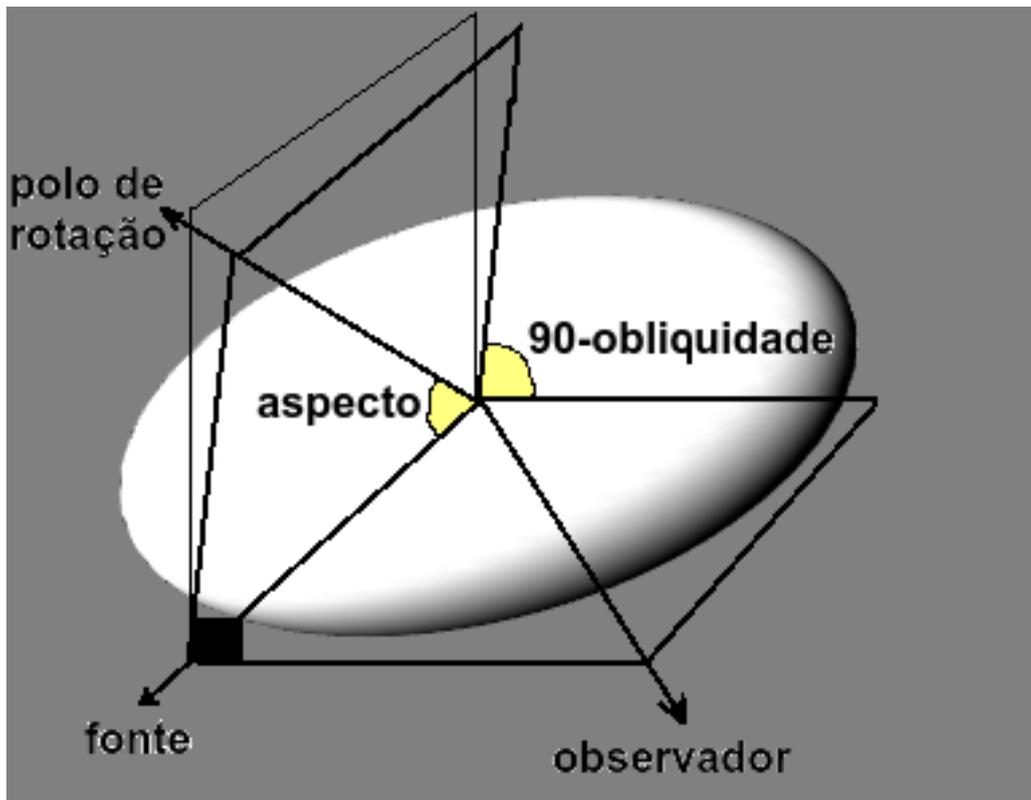


Figura 5.1: Elipsoide com eixos de $a_1 = 1, a_2 = a_3 = 0.5$, com ângulo de aspecto de 30° , obliquidade de 30° e fase de rotação de 60° .

1 Variação dos parâmetros espectrais em função da geometria do elipsoide

Primeiro vamos a começar com um objeto esférico, com fase rotacional de 30° e ângulo de fase de 30° . O meio é considerado estar composto por partículas equantes e transparentes. Para observar os efeitos de forma sobre os parâmetros espectrais, vamos a começar a variar o eixo a_2 do elipsoide quando os outros permanecem constantes e iguais a 1, depois variamos a_3 permanecendo constante a_1 e a_2 , onde para os dois casos o valor de a_1 se fixa a um. A Figura 5.2 é a forma que apresenta o elipsoide quando variamos o eixo a_2 e, a Figura 5.3 é quando

variarmos o eixo a_3 . Para ambas Figuras a variação dos eixos do elipsoide são para 0.7 e 0.4.

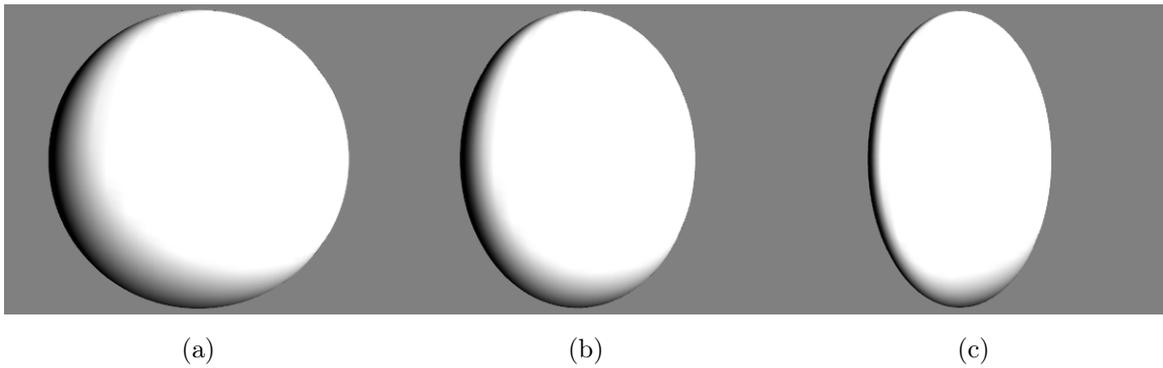


Figura 5.2: Aqui a variação é com respeito ao eixo a_2 . (a) é para um esfera, (b) é para $a_1 = 1.0, a_2 = 0.7, a_3 = 1.0$ e (c) para $a_1 = 1.0, a_2 = 0.4, a_3 = 1.0$.

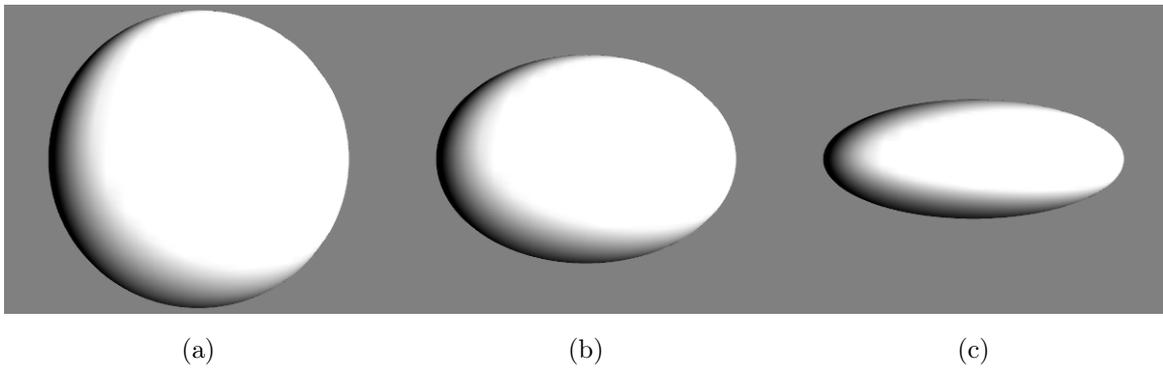


Figura 5.3: Aqui a variação da forma é para o eixo a_3 . (a) é para uma esfera, (b) é para $a_1 = 1.0, a_2 = 1.0, a_3 = 0.7$ e (c) é com $a_1 = 1.0, a_2 = 1.0, a_3 = 0.4$.

Os espectros de refletância gerados para um elipsoide com diferente valor de a_2 são mostrados na Figura 5.4. O espectro de linha preta é gerado para uma geometria plano-paralelo, o espectro de cor azul é para uma forma esférica, o espectro de linha verde é para um elipsoide com $a_2 = 0.7$ e o espectro de linha vermelho é para um elipsoide com $a_2 = 0.4$. Observa-se que o espectro gerado para uma geometria plano-paralelo é maior em refletância no primeiro e segundo máximo que os espectros gerados que incluem efeito de forma. Com respeito às bandas, este espectro não mostra diferença visível na primeira banda mas, mostra-se diferenças na segunda banda, onde é maior em refletância que os espectros com efeito de forma. Podemos observar também que, quando o alongamento do objeto diminui, os espectros de refletância se incrementa ligeiramente entre $1 - 2 \mu\text{m}$.

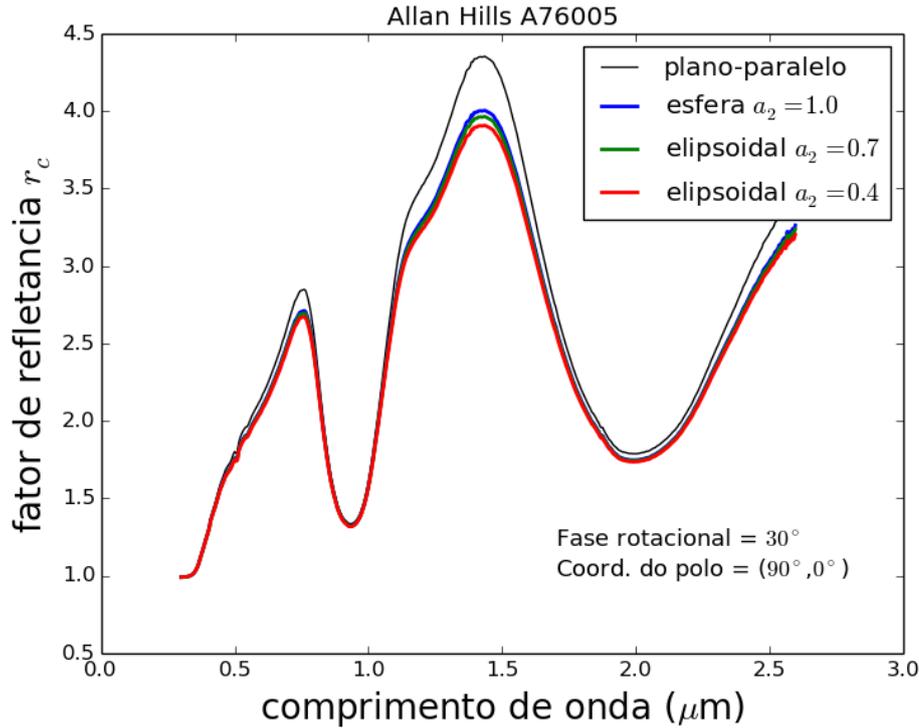


Figura 5.4: Espectros de refletância gerados para diferentes geometrias. O espectro de linha preta é para uma geometria plano-paralelo e os demais são para uma geometria elipsoidal. Os elipsoides têm como fase rotacional 30° e ângulo de fase de 30° .

Na Tabela 5.1, são mostrados os parâmetros espectrais obtidos para os espectros da Figura 5.4. Nesta tabela: a coluna 1 é a geometria do modelo, a coluna 2 e 3 são os centros das bandas de absorção, a coluna 4 é o BAR e a coluna 5 é a inclinação. Não se observa variação para as posições dos centros das bandas para os espectros gerados. A magnitude do parâmetro BAR para o modelo plano-paralelo é maior que o BAR para os modelos elipsoidais, em média o BAR é maior a $\sim 1\%$, mas, esta variação é da ordem do desvio padrão. Observa-se que a inclinação para o modelo plano-paralelo é maior que para os modelos elipsoidais e, quando aumenta o alongamento do elipsoide sua inclinação tende a diminuir. A inclinação para o modelo plano-paralelo é maior em $\sim 19\%$ que a inclinação médio dos modelos elipsoidais.

Tabela 5.1: Comparação dos parâmetros espectrais entre os elipsoides em função do eixo a_2 .

geometria	C-Banda I (μm)	C-Band II (μm)	BAR	Inclinação (μm) ⁻¹
plano-paralelo	0.945	1.950	2.507 ± 0.094	2.241 ± 0.016
esférico	0.945	1.950	2.482 ± 0.091	1.927 ± 0.014
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.945	1.950	2.479 ± 0.090	1.891 ± 0.014
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.945	1.950	2.474 ± 0.090	1.840 ± 0.014

Na Figura 5.5 mostra-se os espectros de refletância gerados a partir de diferentes geometrias do elipsoide variando o eixo a_3 . O espectro de linha azul na Figura 5.5 é para uma esfera, o espectro de linha verde é gerado para um elipsoide com $a_3 = 0.7$, o espectro de linha vermelho é para $a_3 = 0.4$ e, o espectro de linha preta é gerado para uma geometria plano-paralelo. Então, na primeira banda de absorção todos os espectros se sobrepõem, mas, para a segunda banda de absorção há uma ligeira dispersão, incrementando para comprimentos de onda maiores a $2.0 \mu\text{m}$. Observa-se que se têm uma maior dispersão no primeiro e segundo máximo em comparação com a Figura 5.4 onde a variação foi através do eixo a_2 .

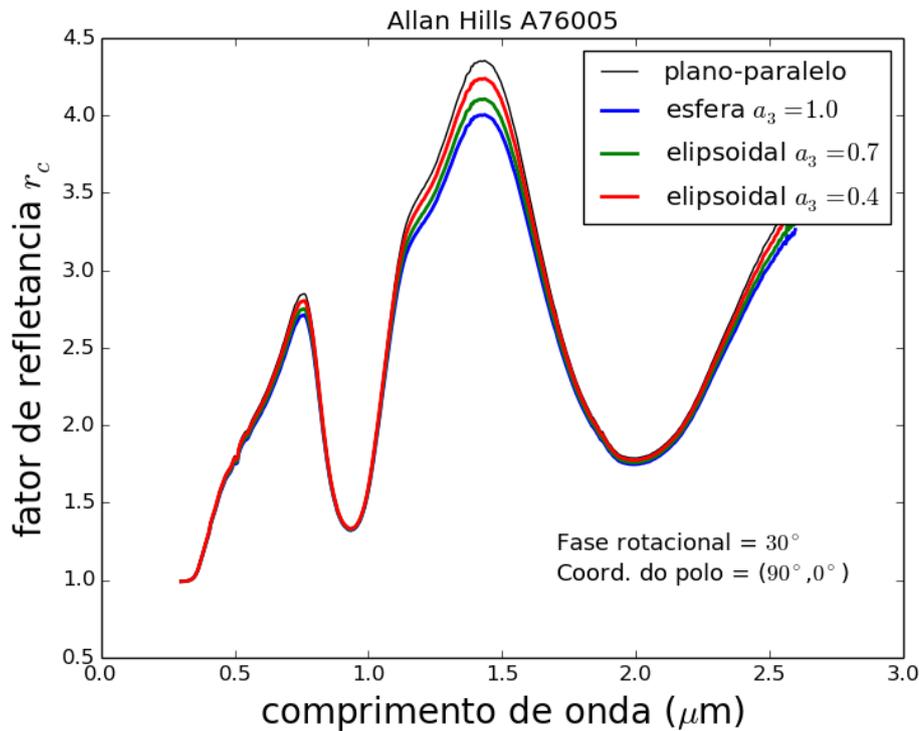


Figura 5.5: Espectros de refletância gerados para distintas geometrias com fase rotacional de 30° e ângulo de fase de 30° .

Na Tabela 5.2 são mostrados os parâmetros espectrais determinados dos espectros da Figura 5.5. Não tem-se variações nos mínimos das banda I e II. O parâmetro BAR para a geometria plano-paralelo só é $\sim 1\%$ maior que o BAR para a geometria esférica. O BAR parece aumentar quando o elipsoide torna-se mais alongado, mas a magnitude desta variação está na ordem do desvio padrão. A inclinação para uma geometria plano-paralelo é maior em $\sim 14\%$ que a inclinação para uma geometria elipsoidal. A diferença vai diminuindo quando o corpo se torna mais alongado. Portanto, a inclinação se incrementa quando o corpo se torna mais alongado. A inclinação para a geometria plano-paralelo é maior em $\sim 11\%$ que a inclinação média para as geometrias elipsoidais. Comparando os valores das inclinações dadas pelos dois geometrias, para uma geometria com $a_3 = 0.7$ sua inclinação é maior em $\sim 7\%$ que para uma geometria com $a_2 = 0.7$. Para um elipsoide com $a_3 = 0.4$ é maior em $\sim 16\%$ que para um elipsoide com $a_2 = 0.4$. O efeito de alongamento do elipsoide pelo equador faz, com que a inclinação de seu espectro se incremente. e seja maior que a inclinação espectral para um elipsoide com alongamento na direção do eixo de rotação.

Tabela 5.2: Comparação dos parâmetros espectrais entre os elipsoides em função do eixo a_3 .

geometria	C-Banda I (μm)	C-Band II (μm)	BAR	Inclinação (μm) ⁻¹
plano-paralelo	0.945	1.950	2.507 ± 0.094	2.241 ± 0.016
esférico	0.945	1.950	2.482 ± 0.091	1.927 ± 0.014
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.945	1.950	2.490 ± 0.092	2.018 ± 0.015
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.945	1.950	2.499 ± 0.093	2.137 ± 0.015

Na Tabela 5.3, mostra-se os parâmetros espectrais para os meteoritos Juvinas, Millibillillie e Elephant Moraine A79002. A inclinação para os meteoritos Juvinas e Millibillillie, mostra variação com a geometria do elipsoide. A inclinação para a geometria plano-paralelo é maior que para qualquer geometria elipsoidal, com ângulo de fase rotacional de 30° . Observa-se também, que a inclinação diminui para uma esfera que evolui sua alongamento na direção do eixo de rotação, e aumenta quando o alongamento do elipsoide é no equador. A Figura 5.6, mostra-se a variação da inclinação em função dos eixos a_2 e a_3 do elipsoide. Para o meteorito Elephant Moraine A79002 não é observado variação da inclinação em função da forma do objeto.

Tabela 5.3: Mostra-se a variação dos parâmetros espectrais para os meteoritos: Juvinas, Millibillillie e Elephant Moraine A79002. A primeira fila de cada grupo de asteroides são os parâmetros para a geometria plano-paralelo. As seguintes filas são para as geometrias elipsoidais.

geometria	C-Banda I (μm)	C-Band II (μm)	BAR	Inclinação (μm) ⁻¹
plano-paralelo	0.960	1.965	2.099 \pm 0.060	1.362 \pm 0.004
esférico	0.960	1.965	2.093 \pm 0.059	1.206 \pm 0.003
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.960	1.965	2.092 \pm 0.059	1.188 \pm 0.003
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.960	1.965	2.091 \pm 0.058	1.163 \pm 0.003
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.960	1.965	2.095 \pm 0.059	1.252 \pm 0.004
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.960	1.965	2.097 \pm 0.060	1.311 \pm 0.004
plano-paralelo	0.940	1.985	1.647 \pm 0.024	1.069 \pm 0.014
esférico	0.940	1.985	1.644 \pm 0.024	0.942 \pm 0.012
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.940	1.985	1.643 \pm 0.024	0.928 \pm 0.012
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.940	1.985	1.643 \pm 0.024	0.907 \pm 0.012
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.940	1.985	1.645 \pm 0.024	0.979 \pm 0.013
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.940	1.985	1.646 \pm 0.024	1.027 \pm 0.013
plano-paralelo	0.920	1.905	1.940 \pm 0.009	0.028 \pm 0.004
esférico	0.920	1.905	1.939 \pm 0.009	0.026 \pm 0.003
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.920	1.905	1.939 \pm 0.009	0.026 \pm 0.003
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.920	1.905	1.939 \pm 0.009	0.025 \pm 0.003
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.920	1.905	1.939 \pm 0.009	0.027 \pm 0.003
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.920	1.905	1.940 \pm 0.009	0.028 \pm 0.004

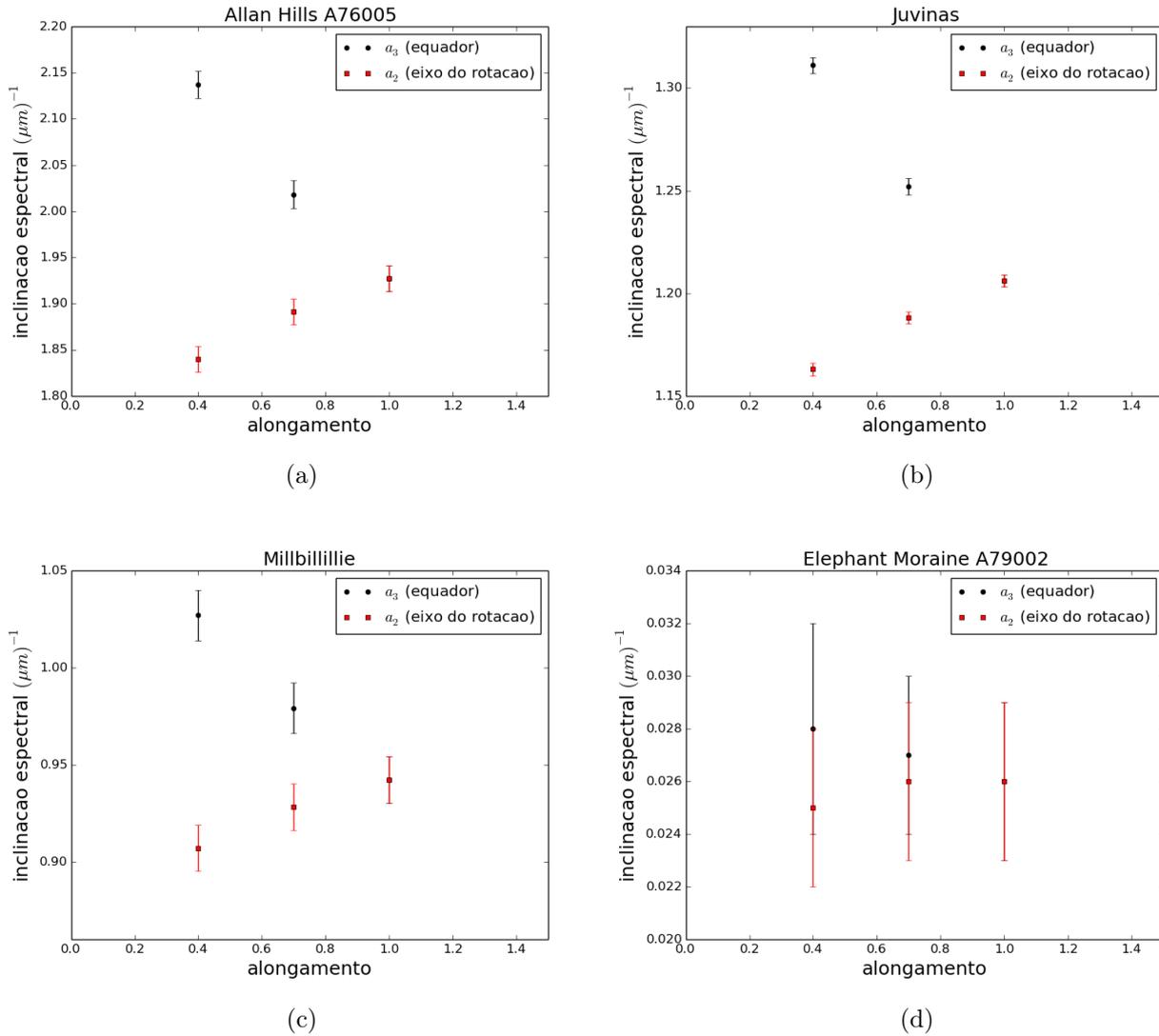


Figura 5.6: Variação da inclinação em função da forma do elipsoide. A variação da forma do elipsoide é primeiro na direção de eixo de rotação, e a segunda variação é através do equador.

2 Variação da inclinação em função do ângulo de fase para uma geometria elipsoidal.

É conhecido que o espectro de refletância de asteroides muda quando é observado a diferentes ângulos de fase para um mesmo objeto (Millis et al., 1976; Hapke, 1993; Sanchez et al., 2012). Por exemplo, para espectros de asteroides ou de meteoritos obtidos no laboratório, a inclinação do espectro tende a aumentar quando é observado a maiores ângulos de fase. A variação da inclinação em função do ângulo de fase, tomando em conta a geometria do objeto e como esta variação pode estar afetando à classificação taxonômica de asteroides, é estudada no capítulo

6. Aqui, para explorar a variação dos parâmetros espectrais em função do ângulo de fase, vamos considerar como geometria os casos estudados anteriormente. A variação do ângulo de fase será entre 10° até 60° . As partículas do meio são consideradas equantes e transparentes, considerando tamanho de grão de $150 \mu\text{m}$.

Na Figura 5.7, mostra-se a variação da inclinação em função do ângulo de fase, para diferentes geometrias do elipsóide, a linha de cor verde é para uma geometria plano-paralelo. A Figura 5.7a, mostra-se a variação para três elipsóides mais a geometria plano-paralela. Os pontos pretos correspondem para uma esfera, os pontos vermelhos correspondem para um elipsóide com eixo $a_3 = 0.7$, e os pontos azuis correspondem para um elipsóide com $a_3 = 0.4$. A variação do eixo a_3 . A Figura 5.7b, mostra-se as variações das inclinações em função do ângulo de fase, para uma variação da forma do elipsóide através do eixo a_2 . A fase rotacional para as três geometrias são constantes e iguais a 0° .

Nas Figuras 5.7a e b, para os elipsóides pode-se observar que quando o ângulo de fase se incrementa, também se incrementa a inclinação do espectro. Esta inclinação é maior a altos ângulos de fase. Na Figura 5.7a, mostra que para um elipsóide com eixo $a_3 = 0.4$, tem uma maior inclinação espectral que para um elipsóide com eixo $a_3 = 0.7$ e é maior também que para uma forma esférica. Também se observa que, conforme o ângulo de fase se incrementa o *slope* para as três geometrias tendem a ser menos distintas. Na Tabela 5.4, mostra-se a variação da inclinação por ângulo de fase. A coluna 1 é a geometria do corpo, a coluna 2 é a variação da inclinação entre os ângulos de fase de $10^\circ - 20^\circ$, a coluna 3 é a inclinação por ângulo entre $20 - 40$ graus e, a coluna 4 é a inclinação por ângulo entre $40 - 60$ graus. No primeiro grupo da tabela que é para o meteorito Allan Hills A76005, pode-se observar que para um elipsóide variando o eixo a_3 a inclinação por grau diminui conforme o objeto se alonga no equador. Para um elipsóide que se alonga na direção da rotação, a inclinação por grau se incrementa. Para uma geometria plano-paralelo a variação da inclinação por grau, mostra um incremento constante até os 40° , e logo a inclinação começa a diminuir, alcançando valor negativo.

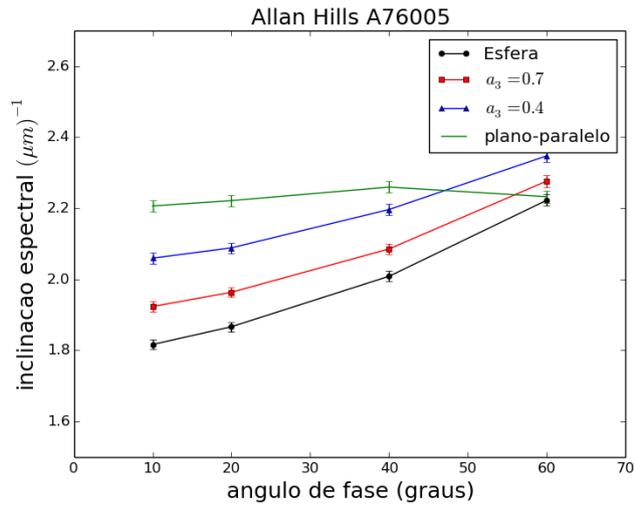
Para o segundo grupo de dados na Tabela 5.4, para o meteorito Juvinas. A inclinação por grau para uma geometria plano-paralela se incrementa conforme se incrementa o ângulo de fase. O mesmo pode-se observar para as outras geometrias, com exceção para o elipsóide $a_2 = 0.4$, onde se mantém constante para os dois intervalos em ângulo de fase, tendo um pequeno incremento no último intervalo. Para um elipsóide com $a_3 = 0.7$ a inclinação por grau no primeiro intervalo de ângulo de fase, tem o mesmo valor que para um elipsóide com $a_3 = 0.4$. No segundo e terceiro intervalo o elipsóide com $a_3 = 0.7$, tem maior inclinação por grau que

para um elipsóide com $a_3 = 0.4$. Para um elipsóide com $a_2 = 0.7$, tem menor inclinação por grau para o primeiro e segundo intervalo em ângulo de fase, que para um elipsóide com $a_2 = 0.4$, tendo o mesmo valor no tercer intervalo.

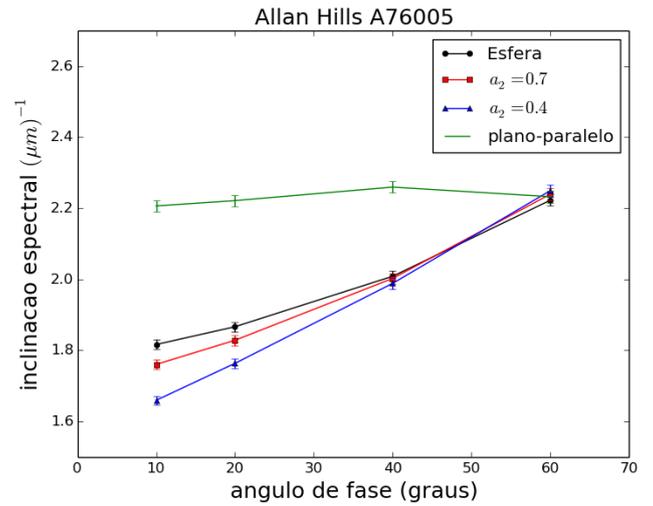
O terceiro grupo, para o meteorito Millbillillie a inclinação por grau para uma geometria plano-paralelo, diminui do primeiro ao segundo intervalo, e mantém-se constante até o tercer intervalo. Para a geometria esférica sua inclinação por grau se incrementa para os três intervalos, o mesmo acontece para as outras geometrias. Se compararmos o incremento da inclinação por grau entre os elipsóides com eixos $a_3 = 0.7$ e $a_3 = 0.4$, observamos que o elipsóide com $a_3 = 0.7$ é maior para o primeiro e tercer intervalo, mas, são iguais para o segundo intervalo. Para os elipsóides com $a_2 = 0.7$ e $a_2 = 0.4$, observa-se que a inclinação por grau no primeiro e segundo intervalo para o elipsóide com $a_2 = 0.7$ é menor que para o elipsóide com $a_2 = 0.4$, mas, no tercer intervalo ambos elipsóides têm valores são iguais.

O ultimo grupo de dados corresponde para o meteorito Elephant Moraine A79002. Aqui, não se observa uma variação significativa para a inclinação por grau para os três intervalos em ângulo de fase. Esta ausência da variação da inclinação já foi observada nas seções anteriores.

As Figuras 5.7, 5.8 e 5.9, que seguem a continuação mostram mesmo comportamento da variação da inclinação em função do ângulo de fase. A inclinação se incrementa quando o elipsóide se alonga no equador (eixo a_3) desde uma forma esférica. Quando o elipsóide se alonga na direção do eixo a_2 desde uma forma esférica, a inclinação para uma forma esférica é maior que para outros elipsóides. Isto é contrario ao caso anterior, mas conforme o ângulo de fase aumenta, esta diferença é cada vez menor, onde aproximadamente a $\sim 50^\circ$ a tendência se inverte, e o objeto com maior alongação passa a ter maior inclinação. Para a Figura 5.10, que corresponde ao meteorito Elephant Moraine A79002, não se observa variação da inclinação em função do ângulo de fase para as diferentes geometrias.

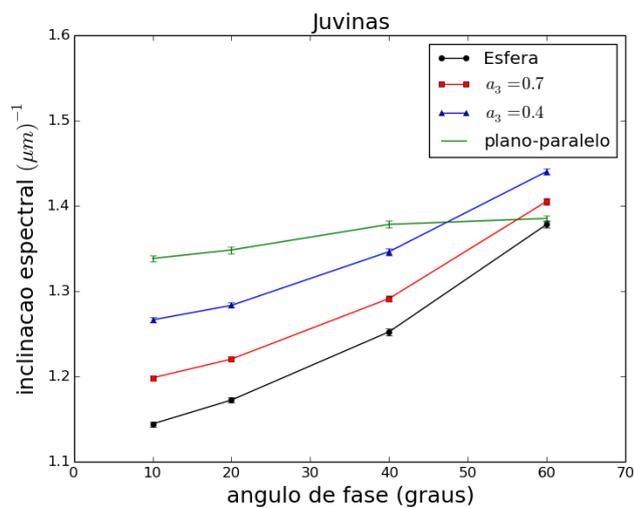


(a)

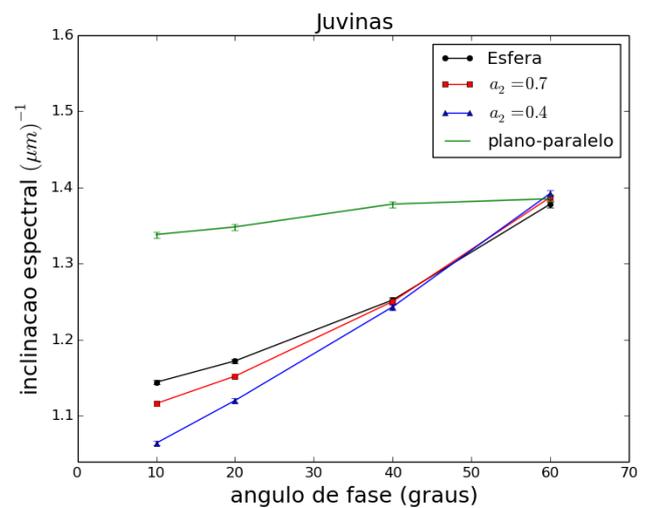


(b)

Figura 5.7: Variação da inclinação espectral em função do ângulo de fase para o meteorito Allan Hills A76005, para uma geometria plano-paralela, esférica e dois elipsoides com variações dos eixos a_3 e a_2 , por separado.

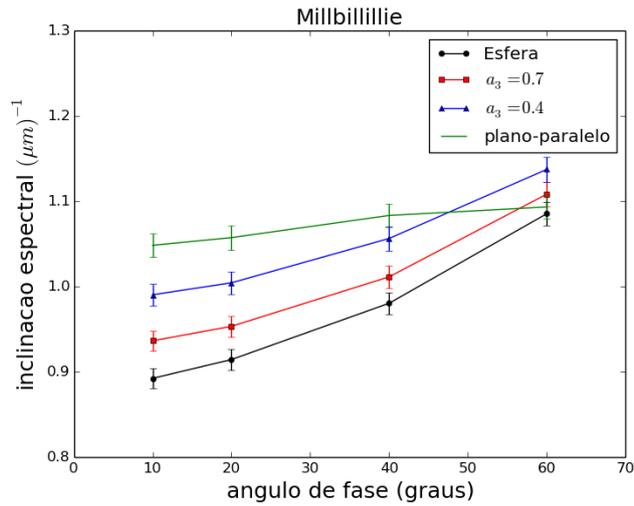


(a)

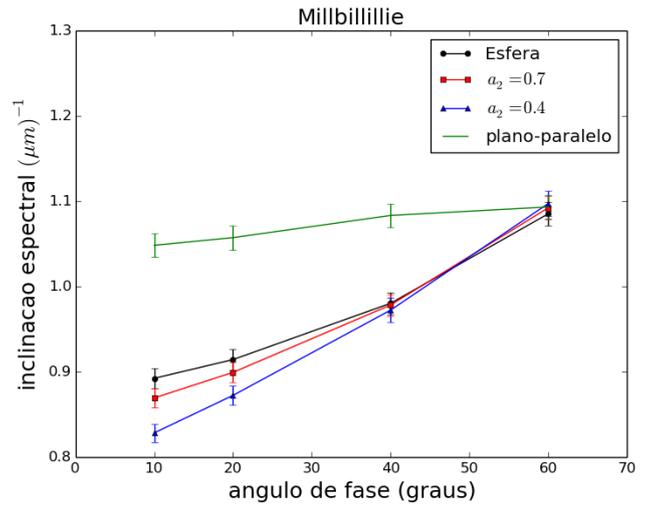


(b)

Figura 5.8: Variação da inclinação espectral em função do ângulo de fase para o meteorito Juvinas, para uma geometria plano-paralela, esférica e dois elipsoides com variações dos eixos a_3 e a_2 por separado.

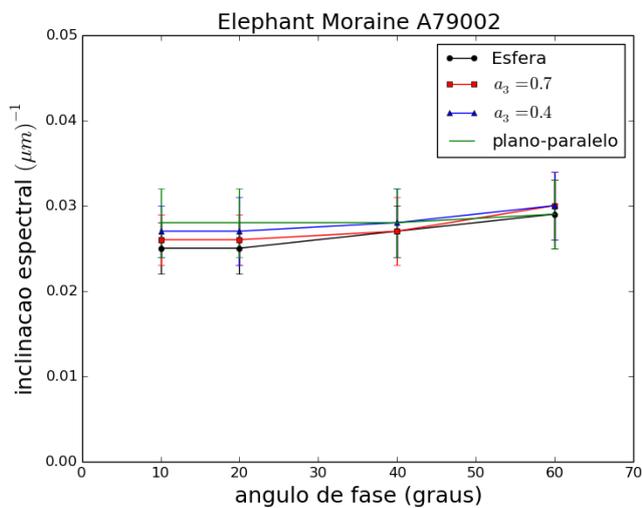


(a)

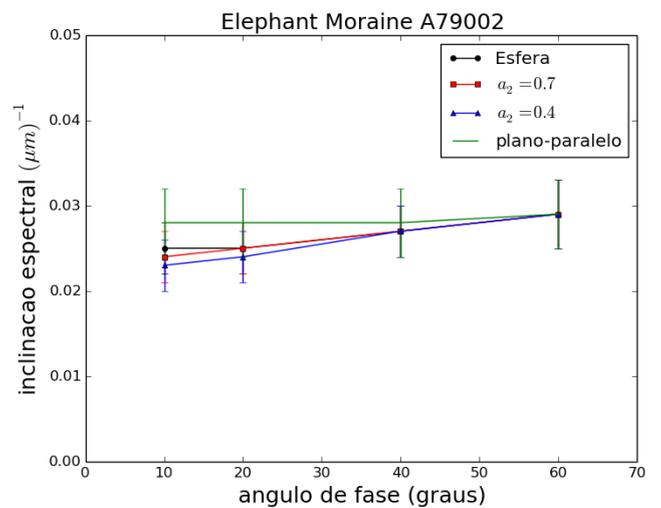


(b)

Figura 5.9: Variação da inclinação espectral em função do ângulo de fase para o meteorito Millbillillie, para uma geometria plano-paralela, esférica e dois elipsoides com variações dos eixos a_3 e a_2 por separado.



(a)



(b)

Figura 5.10: Variação da inclinação espectral em função do ângulo de fase para o meteorito Elephant Moraine A79002, para uma geometria plano-paralela, esférica e dois elipsoides com variações dos eixos a_3 e a_2 por separado.

Tabela 5.4: Variação da inclinação por grau entre os intervalos em ângulo de fase de $10^\circ - 20^\circ$, $20^\circ - 40^\circ$ e $40^\circ - 60^\circ$, para uma geometria plano-paralelo, uma geometria esférica e dois elipsoide com eixos de a_3 de 0.7 e 0.4, para os meteoritos Allan Hills A76005, Juvinas, Millbillillie e Elephant Moraine A79002.

geometria	$\mu\text{m}^{-1}/^\circ$ ($10^\circ - 20^\circ$)	$\mu\text{m}^{-1}/^\circ$ ($20^\circ - 40^\circ$)	$\mu\text{m}^{-1}/^\circ$ ($40^\circ - 60^\circ$)
plano-paralelo	0.002	0.002	-0.001
esférico	0.005	0.007	0.018
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.004	0.006	0.010
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.003	0.005	0.008
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.007	0.009	0.012
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.010	0.011	0.013
plano-paralelo	0.001	0.002	0.0004
esférico	0.003	0.004	0.006
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.002	0.004	0.006
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.002	0.003	0.005
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.004	0.005	0.007
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.006	0.006	0.007
plano-paralelo	0.001	0.001	0.001
esférico	0.002	0.003	0.005
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.002	0.003	0.005
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.001	0.003	0.004
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.003	0.004	0.006
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.004	0.005	0.006
plano-paralelo	0.0	0.0	0.001
esférico	0.0	0.0001	0.0001
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.0	0.0001	0.0002
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.0	0.0001	0.0001
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.0001	0.0001	0.0001
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.0001	0.0002	0.0002

Na Tabela 5.5, mostra-se a variação da inclinação para os ângulos de fase de 10, 20, 40 e 60 graus. Cada grupo corresponde aos meteoritos Allan Hills A76005, Juvinas, Millbillillie e o meteorito Elephant Moraine A79002.

Tabela 5.5: Esta tabela mostra a inclinação para ângulos de fase de 10°, 20°, 40° e 60°. Cada grupo de dados corresponde aos meteoritos Allan Hills A76005, Juvinas, Millibillillie e o meteorito Elephant Moraine A79002, para a geometria plano-paralela, uma geometria esférica, dois elipsoide com eixos de a_3 de 0.7 e 0.4 e outros dois com eixos a_2 de 0.7 e 0.4.

geometria	$\mu\text{m}^{-1}(10^\circ)$	$\mu\text{m}^{-1} (20^\circ)$	$\mu\text{m}^{-1} (40^\circ)$	$\mu\text{m}^{-1} (60^\circ)$
plano-paralelo	2.206 ± 0.016	2.221 ± 0.016	2.259 ± 0.016	2.232 ± 0.017
esférico	1.816 ± 0.014	1.866 ± 0.014	2.008 ± 0.015	2.222 ± 0.016
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	1.923 ± 0.014	1.963 ± 0.014	2.085 ± 0.015	2.276 ± 0.017
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	2.059 ± 0.015	2.088 ± 0.015	2.196 ± 0.016	2.347 ± 0.017
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	1.760 ± 0.013	1.828 ± 0.014	2.002 ± 0.015	2.239 ± 0.017
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	1.659 ± 0.013	1.763 ± 0.014	1.988 ± 0.015	2.249 ± 0.017
plano-paralelo	1.338 ± 0.004	1.348 ± 0.004	1.378 ± 0.004	1.385 ± 0.004
esférico	1.144 ± 0.003	1.172 ± 0.003	1.252 ± 0.004	1.378 ± 0.004
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	1.198 ± 0.003	1.220 ± 0.003	1.291 ± 0.004	1.405 ± 0.004
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	1.266 ± 0.003	1.283 ± 0.004	1.346 ± 0.004	1.440 ± 0.004
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	1.116 ± 0.003	1.152 ± 0.003	1.250 ± 0.004	1.387 ± 0.004
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	1.064 ± 0.003	1.120 ± 0.003	1.243 ± 0.004	1.392 ± 0.004
plano-paralelo	1.048 ± 0.014	1.057 ± 0.014	1.083 ± 0.014	1.093 ± 0.014
esférico	0.892 ± 0.012	0.914 ± 0.012	0.980 ± 0.013	1.085 ± 0.014
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.936 ± 0.012	0.953 ± 0.012	1.011 ± 0.013	1.108 ± 0.014
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.990 ± 0.013	1.004 ± 0.013	1.056 ± 0.014	1.137 ± 0.015
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.869 ± 0.011	0.899 ± 0.012	0.978 ± 0.013	1.092 ± 0.014
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.828 ± 0.011	0.872 ± 0.011	0.972 ± 0.013	1.097 ± 0.014
plano-paralelo	0.028 ± 0.004	0.028 ± 0.004	0.028 ± 0.004	0.029 ± 0.004
esférico	0.025 ± 0.003	0.025 ± 0.003	0.027 ± 0.003	0.029 ± 0.004
elipsoidal ($a_3 = 0.7$)	0.026 ± 0.003	0.026 ± 0.003	0.027 ± 0.004	0.030 ± 0.004
elipsoidal ($a_3 = 0.4$)	0.027 ± 0.003	0.027 ± 0.004	0.028 ± 0.004	0.030 ± 0.004
elipsoidal ($a_2 = 0.7$)	0.024 ± 0.003	0.025 ± 0.003	0.027 ± 0.003	0.029 ± 0.004
elipsoidal ($a_2 = 0.4$)	0.023 ± 0.003	0.024 ± 0.003	0.027 ± 0.003	0.029 ± 0.004

Em conclusão, podemos observar que a variação em média da inclinação por ângulo de fase, é maior para os espectros com efeito de forma, que para os espectros sem efeito de forma.

Por exemplo, para o meteorito Juvinas sua inclinação média por ângulo de fase para uma geometria plano-paralelo é de $0.002 (\mu\text{m})^{-1}/^\circ$, para a geometria esférica é de $0.004 (\mu\text{m})^{-1}/^\circ$, para um elipsóide com $a_3 = 0.7$ é $0.004 (\mu\text{m})^{-1}/^\circ$, para o mesmo elipsóide só mais alongado é $0.003 (\mu\text{m})^{-1}/^\circ$. Para um elipsóide com $a_2 = 0.7$ é de $0.005 (\mu\text{m})^{-1}/^\circ$, e mais alongado é de $0.006 (\mu\text{m})^{-1}/^\circ$. Em média, para um espectro com efeito de forma, a variação da inclinação por ângulo de fase é 50% maior que para um espectro sem considerar o efeito de forma. A variação da inclinação por grau determinado para uma geometria plano-paralela está ao redor dos valores achados por [Sanchez et al. \(2012\)](#), que foi de $0.003 \mu\text{m}^{-1}/^\circ$, para medidas de espectros de refletância de meteoritos condritos ordinários, obtidos no laboratório para ângulos de fase entre 13° e 120° .

Na Figura 5.11, são mostrados os espectros para o meteorito Juvinas para diferentes ângulos de fase, para uma geometria plano-paralela e elipsoidal. Pode-se observar que os espectros se incrementam como um todo conforme são observados a maiores ângulos de fase. Os espectros gerados para uma geometria elipsoidal tem maior dispersão que os espectros gerados para uma geometria plano-paralelo.

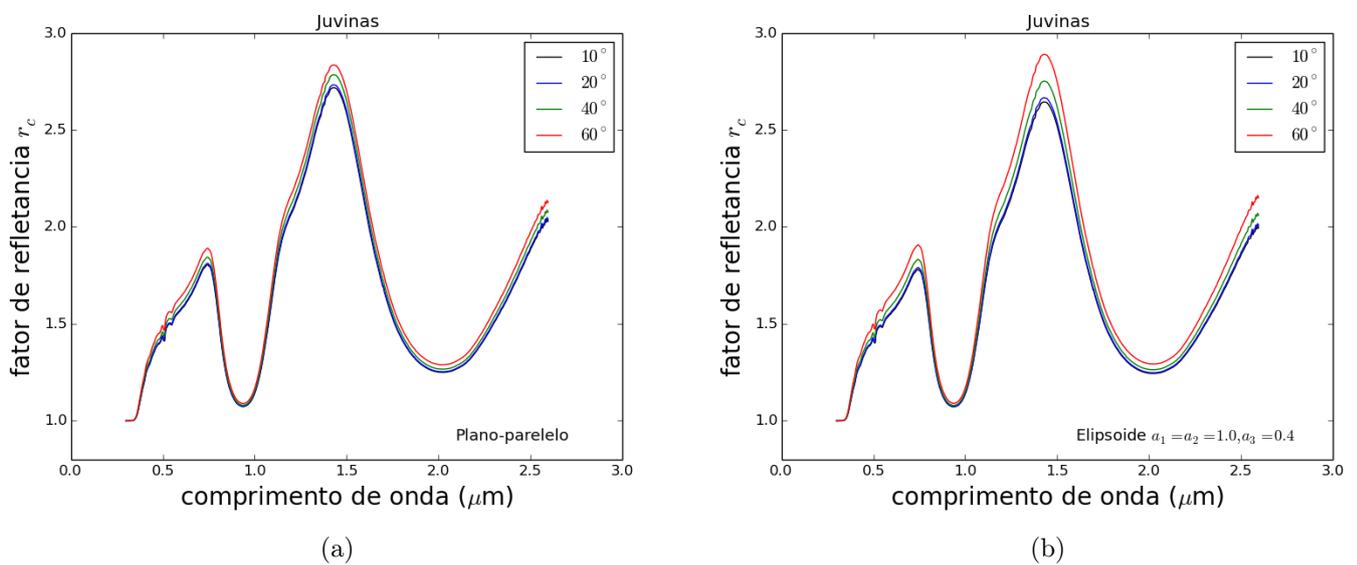


Figura 5.11: Espectros de refletância para o meteorito Juvinas gerados para uma geometria plano-paralelo e elipsoidal para diferentes ângulos de fase.

Capítulo 6

Efeitos fase e forma sobre a classificação taxonômica

No artigo [Carvano et al. \(2010\)](#), se estudou primeiro: como as observações dos asteroides a diferentes ângulos de fase afetam à classificação taxonômica, especialmente entre classes taxonômicas que mostram quase a mesma forma espectral. Segundo, como os parâmetros espectrais dos asteroides que são: a inclinação do espectro na região visível e a profundidade de primeira banda de absorção, estão correlacionados com o ângulo de fase. Finalmente, se gerou um espectro sintético empregando o modelo de Hapke utilizando a constante ótica para a olivina com tamanho de grão de $50 \mu\text{m}$. Para estudar como as expressões no modelo poderiam estar afeitando o espectro, quando é observado a distintos ângulos de fase. Também se considerou o efeito de forma sobre o espectro. Os espectros dos asteroides foram obtidos do Sloan Digital Sky Survey (SDSS), que emprega 5 filtros denominados por $u' g' r' i' z'$, com comprimento de onda central de: 0.354, 0.477, 0.623, 0.763 e $0.913 \mu\text{m}$, respectivamente. A classificação taxonômica dos asteroides observados por o SDDS foi realizado por [Carpvano et al. \(2010\)](#), definindo 9 classes: V_p , O_p , Q_p , S_p , A_p , I_p , D_p , X_p e C_p baseado na taxonômica de [Bus \(1999\)](#). Estas classes são mostradas na Figura 2 do artigo, que são o logaritmo médio da refletância contra o comprimento de onda, deslocadas em refletância só para uma melhor observação.

Em resumo podemos observar que a geometria de visão e a forma do objeto, podem modificar os parâmetros espectrais, como a inclinação do espectro e a profundidade da banda em $1 \mu\text{m}$. A magnitude destas variações pode ser pequena, mas, pode modificar o suficiente para ter variações na taxonomia entre classes como o observado por [Carpvano et al. \(2010\)](#) e [Sanchez et al. \(2012\)](#). O interessante aqui seria identificar objetos que tenham uma chance de

mais de 50% em que as variações de seus parâmetros espectrais são devido a os mecanismos estudados aqui. Mas este ponto é difícil, porque temos poucos asteroides que tenham suas propriedades superficiais bem caracterizadas. Finalmente podemos dizer que até certo ponto, é importante tomar em conta estes efeitos ao interpretar classificação taxonômica de asteroides, especialmente para objetos onde seu espectro cai entre classes taxonômicas específicas.

1 Artigo: Shape and solar angle effects on the taxonomic classification of asteroids

Shape and solar phase angle effects on the taxonomic classification of asteroids

J. M. Carvano¹ and J. A. G. Davalos¹

Observatório Nacional, rua Gal. José Cristino 77, São Cristóvão, 20921-400, Rio de Janeiro, Brazil
e-mail: carvano@on.br

Received April 7, 2015; accepted ?

ABSTRACT

Context. The taxonomic classification of SDSS observations of asteroids show a dependency on the phase angle of the observations.

Aims. Quantify this dependence and use Hapke models to investigate its cause.

Methods. Statistical methods are used to characterize the taxonomic variation with phase angle. The effect of several Hapke parameters on the spectral slope and band depth of synthetic spectra for a slab and for ellipsoids with different oblatenesses are then analyzed.

Results. Effects linked to body shape and the solar phase function and macroscopic roughness can alter key spectral parameters related to taxonomic classification depending on the solar phase angle, rotational phase of the observation and shape of the asteroid. Depending on the oblateness of the body shape effects are comparable to phase effects.

Key words. asteroid – taxonomy – hapke models

1. Introduction

Asteroid taxonomy is the effort of grouping asteroids into classes based on similarities of a number of their observational properties (Tholen & Barucci 1989). The most used properties include measurements of their spectral reflectance (by means of low resolution spectra, spectro-photometry or colors) and geometric albedo. The usefulness of asteroid taxonomic classes derived in this way relies on the assumption that the classes bear some correspondence to the mineralogy of the asteroids, and on the fact that such classification can be made using types of observations that presently are available to a large number of asteroids. Therefore, asteroid taxonomy can be used to infer trends in the distribution of compositions in the Main Belt and other populations (Mothé-Diniz et al. 2003; DeMeo & Carry 2013), as an additional parameter in defining asteroid families (Cellino et al. 2002; Mothé-Diniz et al. 2005), and as a selection tool to identify candidates for more detailed observations (Roig & Gil-Hutton 2006; Moskovitz et al. 2008; DeMeo et al. 2014). However, the fact that the correspondence between taxonomic class and composition is far from perfect is still sometimes overlooked in the literature. Indeed, although a taxonomic classification narrows down the possible mineralogies of a given asteroid, it will seldom point unequivocally to one particular mineralogy. This happens for a number of reasons, some linked to the intrinsic difficulty involved in the remote characterization of the mineralogy of an asteroid, since it depends on the presence of absorption bands in its reflectance spectrum which may be absent or not completely sampled by the observations used to derive taxonomy. Other problem here is the exposure of the material on the surface of the asteroid to space weathering effects, such as solar wind implantation and micro-meteorite bombardment, which can change the optical properties of the material. Finally, the overall shape of the reflectance spectrum of an asteroid is

also affected by the geometry of the observation, as well as by its shape.

Recently, while analyzing the distribution of SDSS-based taxonomies (Carvano et al. 2010; Hasselmann et al. 2011) in the Vesta family, Jasmim et al. (2013) noted a considerable number of asteroids classified as Q_p , along with the dominant V_p class. Mineralogy inferred from NIR spectra of a sample of V_p and Q_p in the family showed, that although the Q_p asteroids presented a shallower $1\mu\text{m}$ band than the V_p asteroids, their silicate mineralogy were essentially the same. Interestingly, however, it was noted that the distribution in solar phase angle of the asteroids classified as Q_p was markedly different from the V_p asteroids in the family, with the Q_p showing a clear concentration around low phase angles.

In this work we analyze how the classification of asteroids observed by the Sloan Digital Sky Survey is affected by the solar phase angle of the observation and discuss the possible causes of this behavior using Hapke bidirectional reflectance models (Hapke 2012b). In Section 2 we analyze the distribution in phase of the main taxonomic classes of asteroids observed by the Sloan Digital Sky Survey (Jurić et al. 2002) and also the correlation with phase angle of the spectral parameters (spectral slope and band depth) that affect the most the taxonomic classification of asteroid spectra. In Section 3 we analyze how the several parameters that control the phase dependency of the reflectance in Hapke model affect the spectral slope of synthetic spectra, considering the effects of the shape of the asteroids, and the results are further discussed and summarized in Section 4.

2. Phase effects in SDSS data

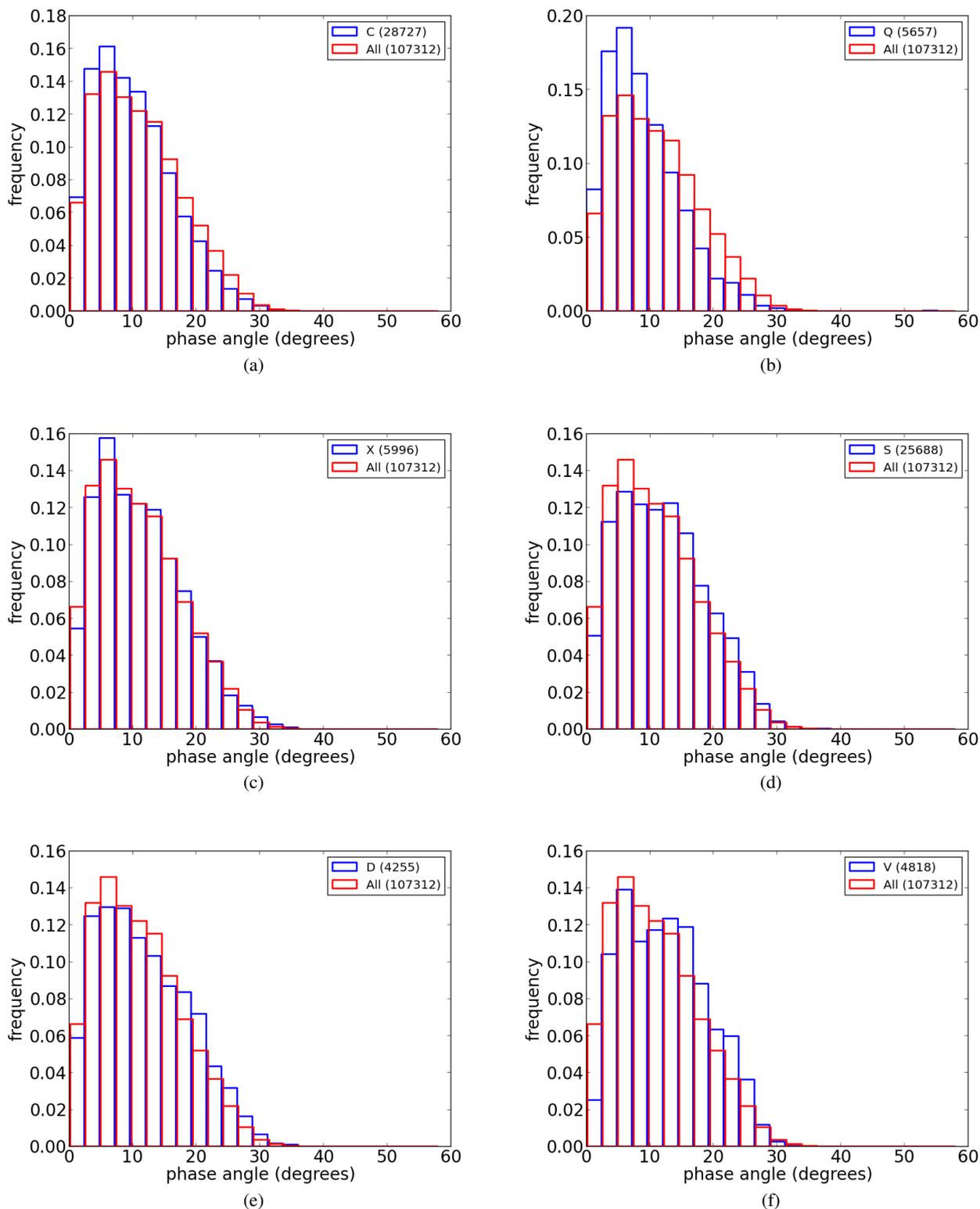


Fig. 1: Distribution in phase angle of the observation of asteroids classified as C_p , X_p , D_p , Q_p , S_p , and V_p , compared with all SDSS observations classified by Carvano et al. (2010). The number of observations involved in each distribution is given in parenthesis.

2.1. Effects on taxonomic classification

Figure 1 shows the distribution on solar phase angle of SDSS observations of asteroids that were classified by Carvano et al. (2010) as C_p , X_p , D_p , Q_p , S_p , or V_p . These classes sample well

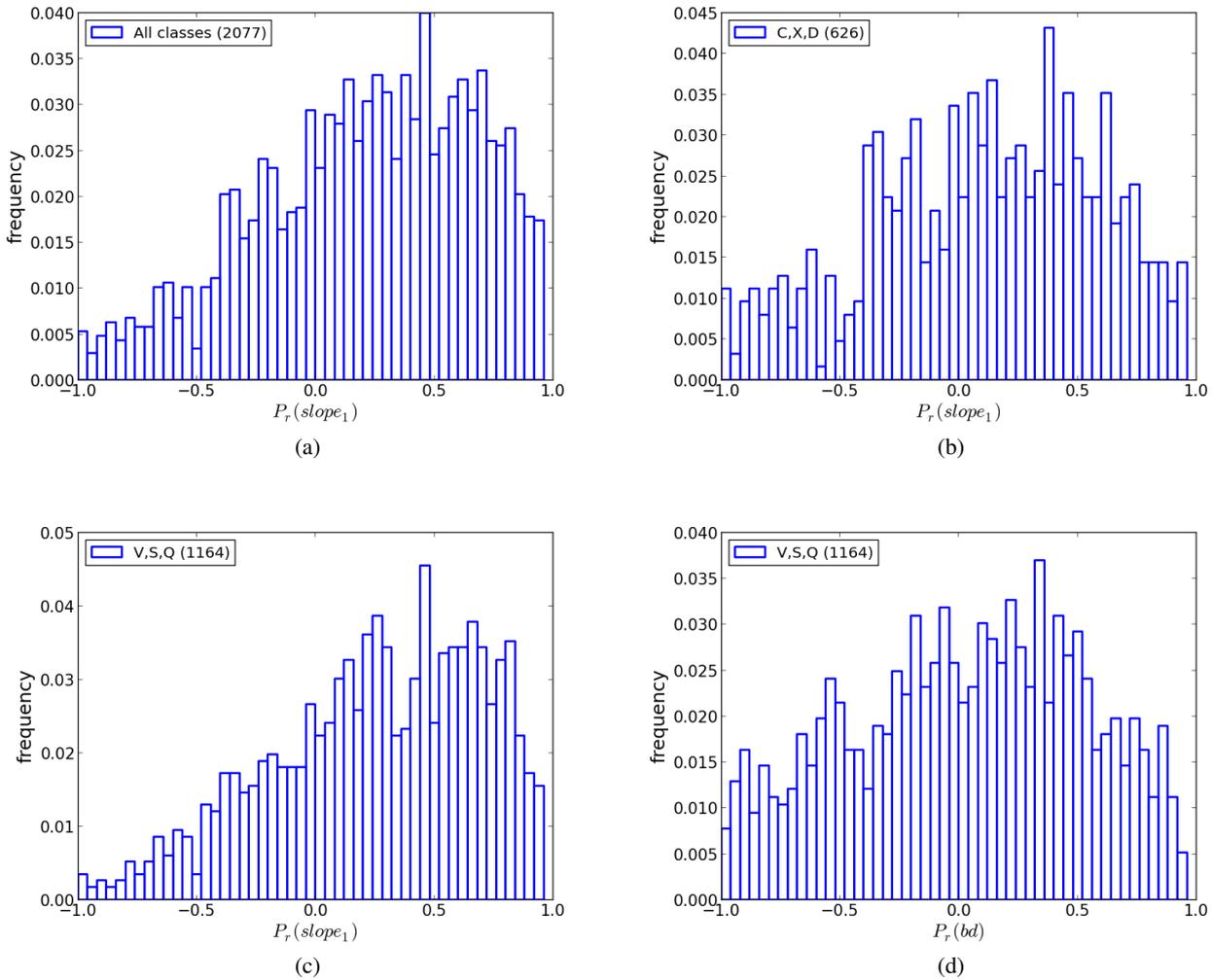


Fig. 3: Distribution of Pearson's correlation coefficient between phase angle of observation and the spectral parameter $slope_1$ and bd for classified asteroids that were observed more than 4 times, spanning a phase angle interval greater than 10° .

Sample	Parameter	Total	Correlation (%)	No correlation (%)	Anti-correlation (%)
All	$slope$	2077	1150 (55.4)	508 (24.4)	419 (20.2)
C,X,D	$slope$	626	295 (47.1)	164 (38.2)	167 (26.7)
V,S,Q	$slope$	1164	692 (59.5)	274 (23.5)	198 (17.0)
V,S,Q	bd	1164	480 (41.2)	310 (26.6)	374 (32.2)

Table 1

the main features that dominate the shape of the visible spectra of most asteroids. The Q_p , V_p , and S_p classes are characterized by the presence of a broad $1\mu m$ band, due to presence of olivine and or pyroxenes, whose wing in the reflectance spectra derived from SDSS color is seen as a sharp drop in the reflectance beyond $0.7\mu m$. V_p spectra tend to be somewhat red before $0.7\mu m$ and show a steep fall in reflectance due to a deep $1\mu m$ band, while spectra of the Q_p are less red before $0.7\mu m$ and have a less deep band; the S_p class on the other hand are redder before $0.7\mu m$ but show a much shallower band. The C_p , X_p , and D_p classes on the other hand have no band in their visible spectra and differ only by their spectral slope: for C_p it ranges from bluish to flat, X_p have moderately red spectra, and D_p have redder spectra, with

higher positive spectral slope. **The template spectra for each class is shown in figure 2**

In Figure 1 the distribution of those classes in phase angle is compared to the distribution of all observations that were classified by Carvano et al. (2010), and the similarities of the distributions were quantified using a Kolmogorov-Smirnov test, **which assesses the hypothesis that two samples having the same distribution and yields the probability p_{KS} of the veracity of that hypothesis. A value of p_{KS} larger than the considered significance level (usually %1 or %5) would then mean that the two samples cannot be distinguished statistically**. If classification were not affected by the phase angle of the observation one should expect that the distribution of all classes were identical to the distribution of the whole sample. That is not however

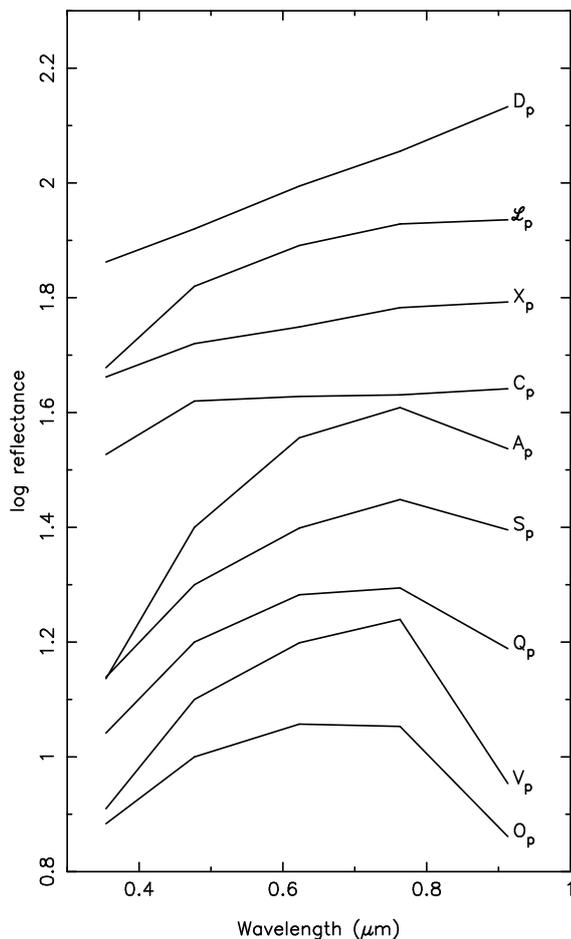


Fig. 2: Template spectra of the taxonomic classes defined in Carvano et al. (2010)

what happens. From Fig. 1 is clear that there is an excess of observations classified as Q_p at low phase angles and an deficit of observations with this classification at higher phase angles, with the reverse occurring for the S_p and V_p classes. This effect was originally noted by Jasmim et al. (2013) when analyzing the presence of Q_p asteroids in the Vesta family. Considering the classes without band, we have that the observations classified as C_p are also more frequent at low phase angles and missing at higher phase angles with the opposite happening to the observations with D_p class, while the distribution of observations with X_p class more closely reproducing the distribution of all observations. Except for the X_p class, which have a $p_{KS} = 0.507$ all other have $p_{KS} \approx 0.0$ and therefore their distributions in phase that are statistically different from the distribution of the whole sample.

These effects are in principle consistent with what should be expected from phase reddening effects (Millis et al. 1976; Gradie & Veveřka 1986; Sanchez et al. 2013; Reddy et al. 2015). Essentially, we could explain the discrepancies in the phase angle distributions assuming that objects with mineralogies which would yield spectra compatible with S or V but close to the limits of the Q_p class) at intermediate phase angles would exhibit a spectra compatible with the Q_p class at lower phase angles, and vice-versa. Similarly, objects with spectra that are borderline between C_p and X_p would show as C_p at low phase angle and X_p at higher phase angles, while objects with border-

line spectra between X_p and D_p would appear as X_p at low phase angles and as D_p at higher values.

2.2. Effects on spectral parameters

In order to understand how variations of phase angles affect on the reflectance spectra of individual the asteroids listed in the SDSS with multiple observations we use the reflectance spectra derived from SDSS colors to define two parameters. The first, $slope_1$ measures the reddening of the visible part of the spectra and is defined as the gradient of the reflectance between SDSS filters g' and i' :

$$slope = \frac{R_i - R_g}{\lambda_i - \lambda_g} \quad (1)$$

, where R and λ are the reflectance and central wavelength in microns of the filters. The second parameter, which measures the depth of the $1 \mu m$ band, is simply the difference of the reflectances between the z' and i' filters,

$$bd = R_z - R_i \quad (2)$$

This last parameter is only meaningful for classes with such feature, while $slope$ is a valid indicator of reddening for all classes. To calculate these parameters we first normalized the reflectance spectra at the r' filter, **following the convention usually adopted for the SDSS asteroid data**.

Those parameters were calculated for all observations of asteroids with SDSS classification that were observed at least 3 times, spanning an range of phase angles larger than 10 degrees (Hasselmann et al. 2011); then for each asteroid we used the Pearson rank order correlation coefficient P to assess the existence of correlation between each parameter and the phase angle. Figure 3 show the distribution of the correlation coefficient of $slope$ for all asteroids that satisfy the mentioned criteria (2077 objects) and for sub-samples of C_p , X_p or D_p asteroids (626) and V_p , S_p or Q_p asteroids (1164), and also the distribution of the correlation coefficient for ΔR_{iz} for the last sub-sample. If we consider that values of $P > 0.2$ indicate a statistically meaningful correlation, values $-0.2 \leq P \leq 0.2$ indicate the absence of any meaningful correlation and that $P < -0.2$ indicates a statistically meaningful anti-correlation, then the number of asteroids in each case is given in **Table 1** for the four samples displayed in Figure 3. From these numbers it is clear that most asteroids in the sample tend to be redder at higher phase angles, and that for the classes showing a $1 \mu m$ band, most show increasing band depth with increasing phase angle. This predominance of positive correlations for both band depth and spectral slope might suffice to explain the offsets in the distribution of classes in phase angle that were shown in Section 2.1.

However, for both parameters there is a significant fraction in each sample for which there seem to be no correlation at all, and a comparable number seem to display anti-correlation between the parameters and the phase angle. Figure 4 show examples of the variation of $Slope$ with phase angle for two asteroids. In Figure 4 (a) is shown an S-type asteroid for which a clear correlation between $Slope$ and phase angle is seen. Even so, there is a considerable scatter in the $Slope$ values, that is greater than the calculated uncertainty for the parameter. Figure 4 (b) shows a C-type asteroid with no clear correlation and with a scatter again greater than the uncertainties in the data.

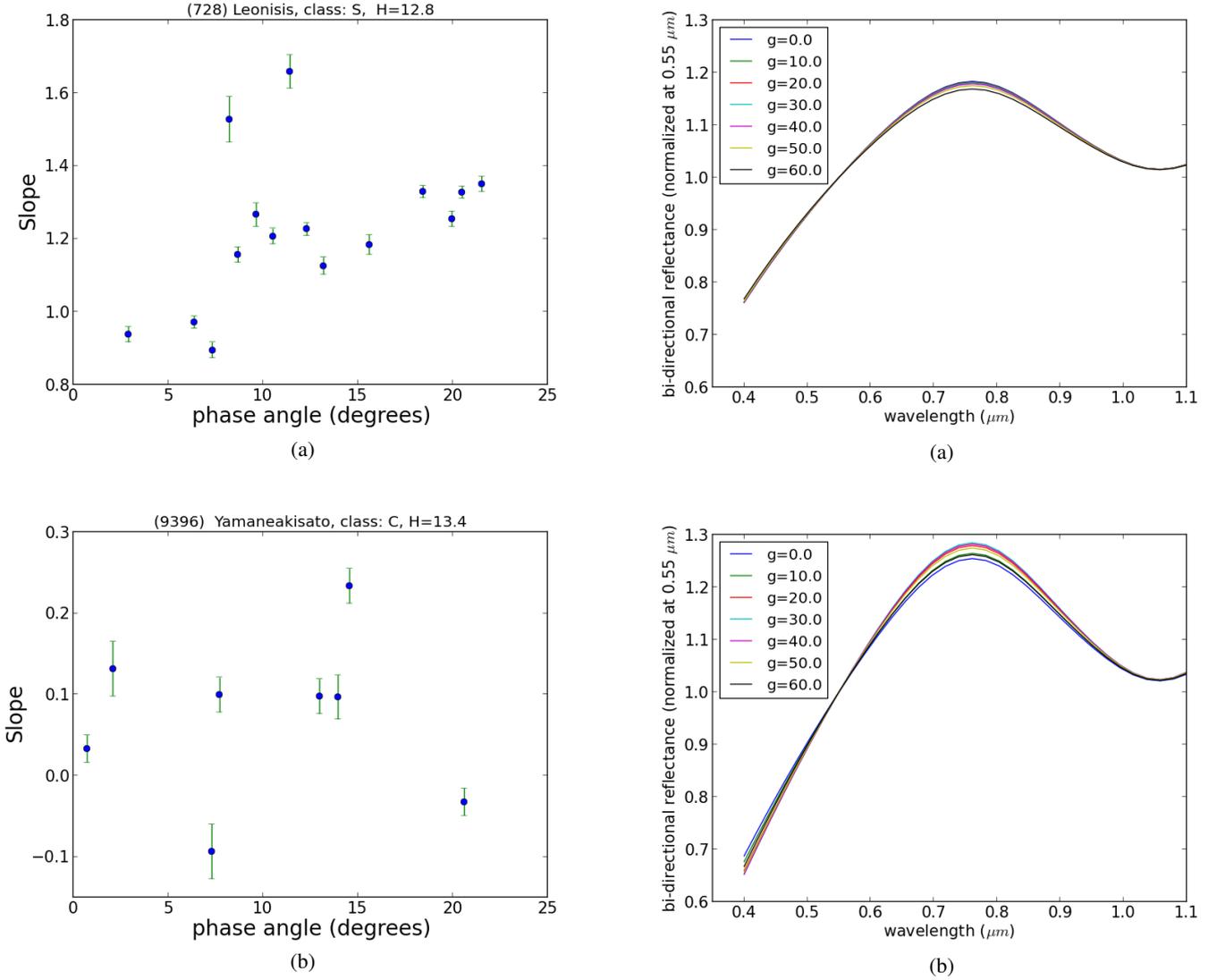


Fig. 4: Variation of slope with phase angle for: (a) the S-type asteroid (728) Leonis and (b) the C-type asteroid (9396) Yamaneakisato.

3. Hapke models

In order to gain a better understanding about the effects of observation geometry and shape over the SDSS spectra we use Hapke theory to model the bi-directional reflectance of asteroids. Hapke bi-directional reflectance models consist of analytic approximations to the solution of the radiative transfer equation on a plane, semi-infinite particulate medium, modified to include some semi-empirical terms to account for additional physical effects (Hapke 1993). The latest version of Hapke’s formula for the bi-directional reflectance includes parameters to describe the effects of solar phase, porosity, macroscopic roughness, shadow-hiding and coherent backscatter (Hapke 1984, 1986, 2002, 2008)

The parameter that control the variation of the reflectance spectra with phase angle are the ones related to the phase function of the material, to the opposition effect, and to the macroscopic roughness of the surface. The adopted expression for the bi-directional reflectance is then:

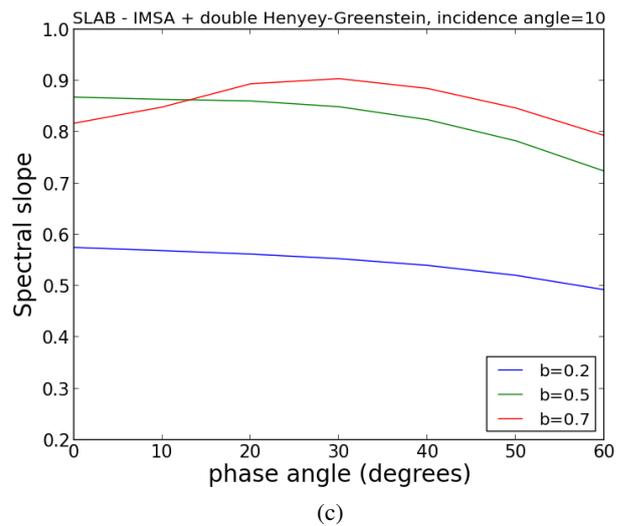


Fig. 5: (a) reflectance spectra of a slab for $b=0.2$ for phase angles between 0° and 60° ; (b) same for $b=0.7$; (c) Slope as function of phase angle for $b \in [0.2, 0.5, 0.7]$

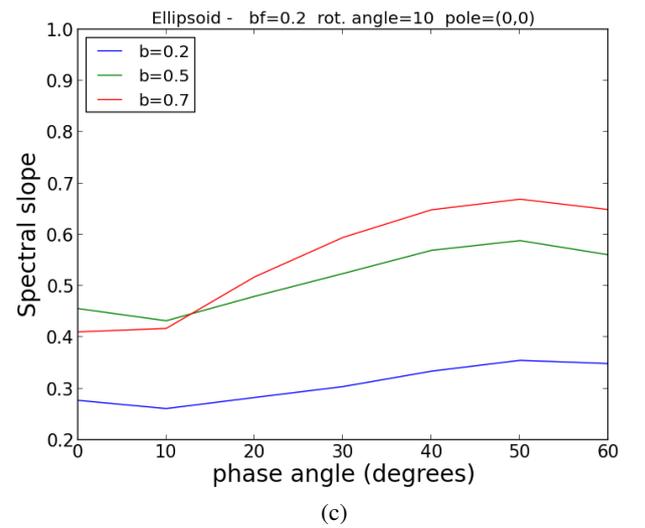
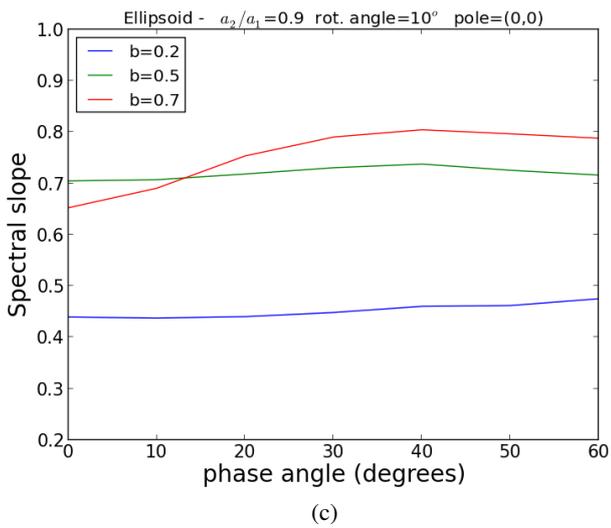
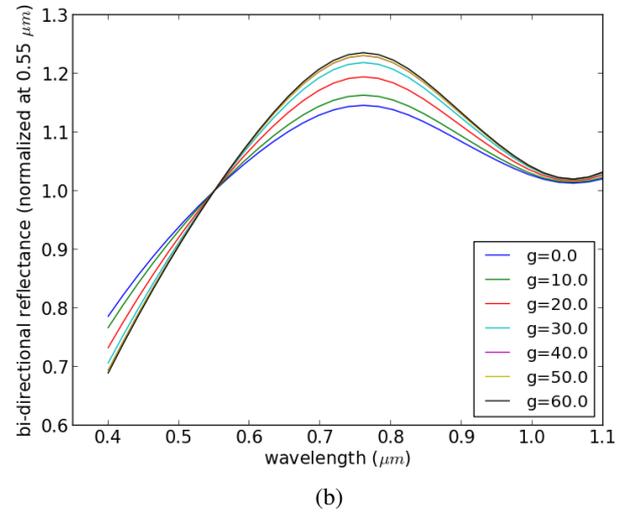
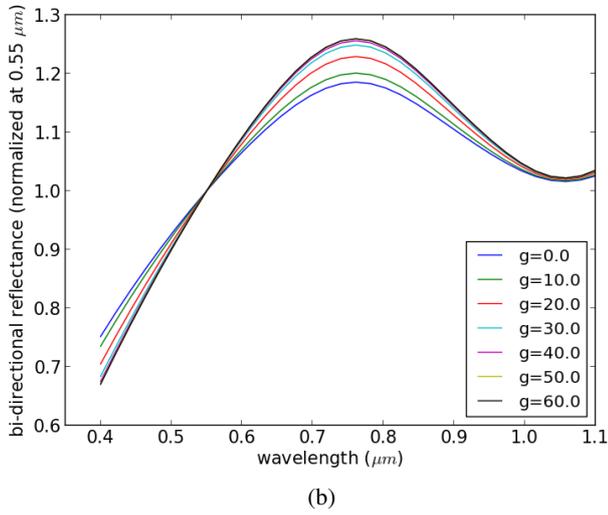
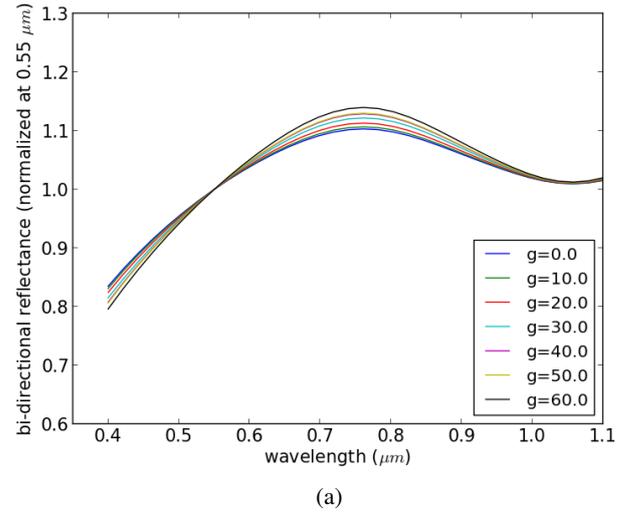
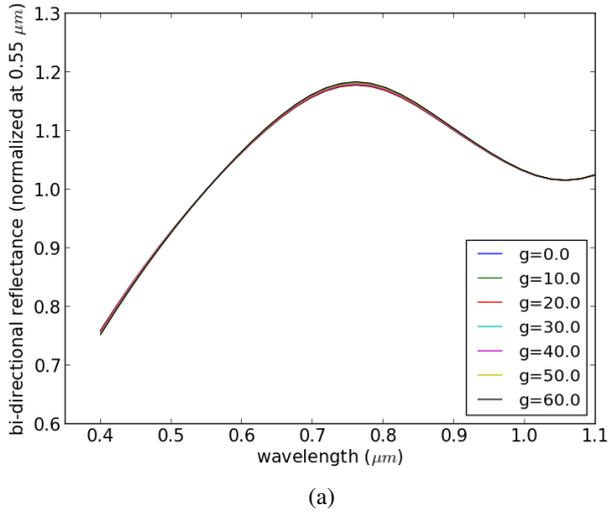


Fig. 6: (a) reflectance spectra of a spheroid with $a_2/a_1=0.9$ for $b=0.2$ for phase angles between 0° and 60° ; (b) same for $b=0.7$; (c) Slope as function of phase angle for $b \in [0.2, 0.5, 0.7]$

Fig. 7: (a) reflectance spectra of a spheroid with $a_2/a_1=0.2$ for $b=0.2$ for phase angles between 0° and 60° ; (b) same for $b=0.7$; (c) Slope as function of phase angle for $b \in [0.2, 0.5, 0.7]$

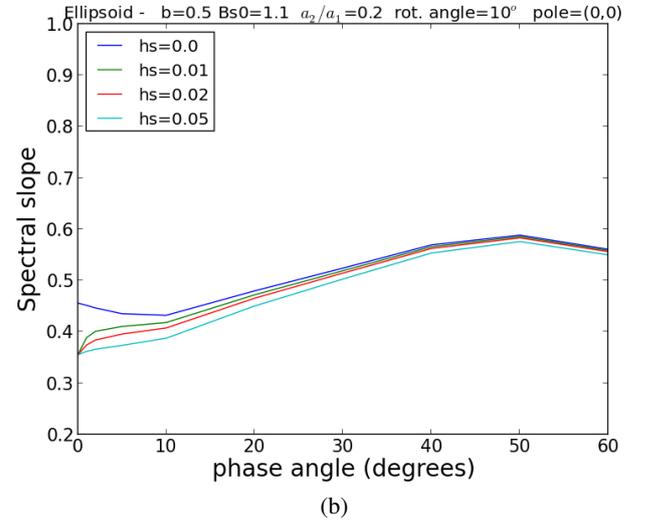
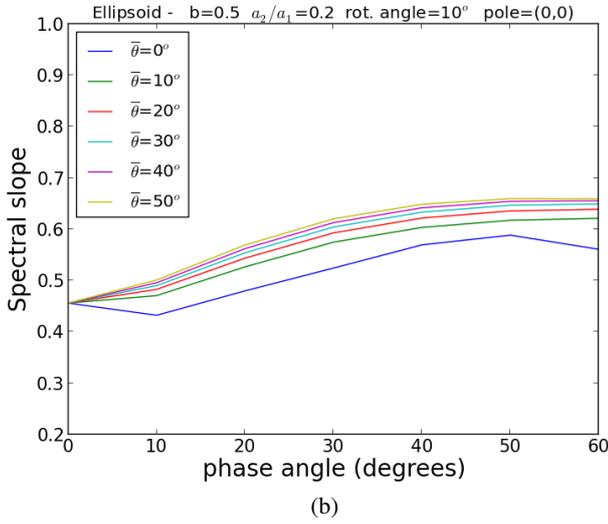
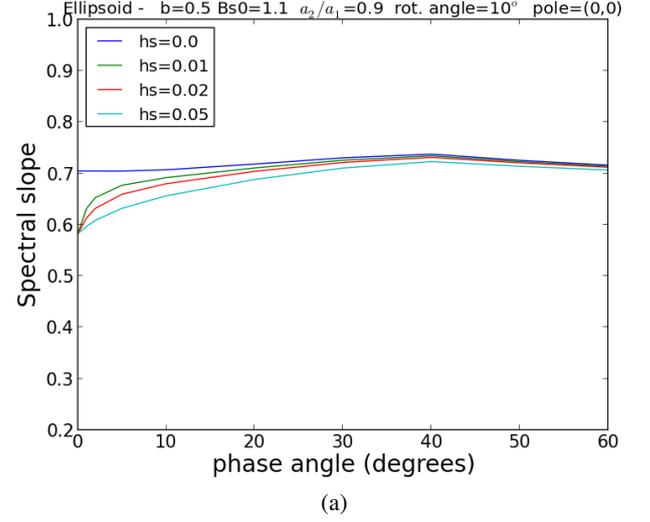
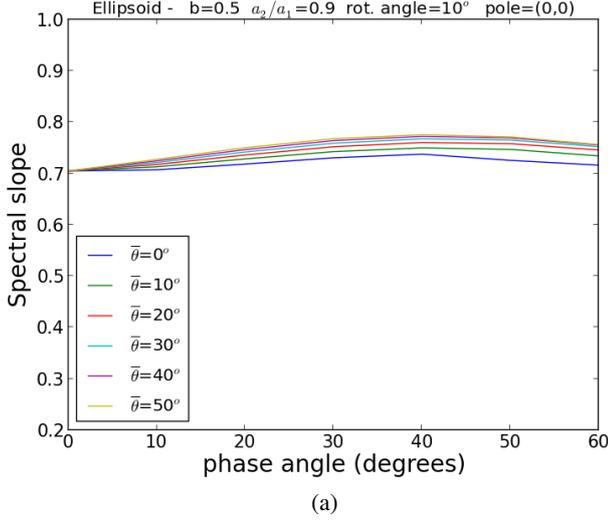


Fig. 8: (a) slope as function of fase angle, considering rugosity for several values of $\bar{\theta}$ for a spheroid with $a_2/a_1 = 0.9$ and $b = 0.5$ for phase angles between 0° and 60° ; (b) same for $a_2/a_1 = 0.2$

Fig. 9: (a) slope as function of fase angle, considering shadow-hidding opposition effect with $B_{S0} = 1.1$ and several values of h_s for a spheroid with $a_2/a_1 = 0.9$ and $b = 0.5$ for phase angles between 0° and 60° . The curve maked with $h_s = 0.0$ do not includes the opposition effect (b) same for $a_2/a_1 = 0.2$

$$r_\lambda = \frac{w_\lambda}{4\pi} \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} [p(g)B_{SH}(g) + M(w_\lambda, \mu_0, \mu)] S(\theta, \psi, \mu_0, \mu) \quad (3)$$

In this expression, w_λ is the average volumetric single scatter albedo of the material at the wavelength λ , p is the phase function, g is the phase angle, μ_0 and μ are, respectively, the cosines of the angle between the illumination and observation directions with the normal of surface of the medium, M is the multiple scattering function (Hapke 2002), B_{SH} is the function for the shadow-hiding opposition effect (Hapke 1986), and S is the shadowing function (Hapke 1984).

For planetary applications, the most adopted phase function is the empirical Henyey-Greenstein function, and here we use the double-lobed version of this function (Hapke 2002):

$$p(g) = \frac{1+c}{2} \frac{1-b^2}{(1-2bc \cos g + b^2)^{3/2}} + \frac{1-c}{2} \frac{1-b^2}{(1+2bc \cos g + b^2)^{3/2}}$$

$$b = \left[\frac{1}{17.4} \ln \left(\frac{3.29}{0.908 + c} \right) \right]^{1/2} \quad (4)$$

The parameters in this function are related to the asymmetric cosine ε of the medium as $\varepsilon = -bc$. Laboratory measurements suggest that, for particle within a large range of compositions and textures, b and c follow an empirical relation (Hapke 2012a):

$$b = \left[\frac{1}{17.4} \ln \left(\frac{3.29}{0.908 + c} \right) \right]^{1/2} \quad (5)$$

The multiple scattering function is given by:

$$M(w_\lambda, \mu_0, \mu) = P(\mu_0) [H(\mu) - 1] + P(\mu) [H(\mu_0) - 1] + \mathcal{P} [H(\mu) - 1] [H(\mu_0) - 1] \quad (6)$$

Here, H is the Ambartsumian-Chandrasekhar function which depends also on w_λ and is calculate here as:

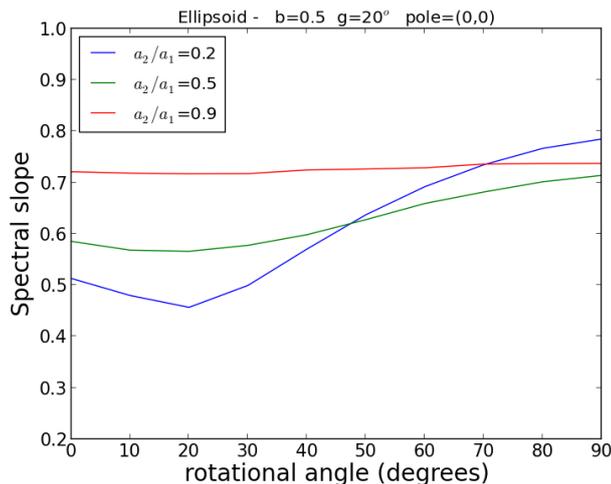


Fig. 10: Variation of the spectral slope with rotation for $b = 0.5$ and different values of a_2/a_1

$$H(x) = \left[1 - w_\lambda x \left(r_0 + \frac{1 - 2r_0 x}{2} \ln \frac{1+x}{x} \right) \right]^{-1} \quad (7)$$

where $r_0 = \frac{1 - \sqrt{1-w_\lambda}}{1 - \sqrt{1+w_\lambda}}$. The functions P and \mathcal{P} are calculated using Legendre polynomial expansion of the phase function (Hapke 2002) and therefore depend implicitly on its coefficients (but not on the phase angle).

The shadowing function S describes the macroscopic roughness effect and has an explicit dependency on the azimuth angle ψ , which is a function of the phase angle and the incidence and emergence angles. The magnitude of this effect increases with the mean slope angle of the surface (or roughness parameter), $\bar{\theta}$. We are modeling the opposition effect using only the shadowing function:

$$B_{SH} = 1 + B_{S0} \left[1 + \frac{1}{h_s} \tan(g/2) \right]^{-1} \quad (8)$$

where B_{S0} is the amplitude of the opposition effect and h_s is its angular width.

Equation 3 models the bi-directional reflectance of a plane slab, with well defined illumination and observation angles. For Earth-based observations of asteroids on the other hand the observables are integrated over the visible and illuminated portions of the body. To model the shape effects we consider shape models of asteroids made of triangular facets, with the reflectance of each facet described by eq. 3, and the observed reflectance will be the sum of the contribution of each facet, whose illumination and observation cosine will be functions of the direction of the observer and the sun, the direction of the rotation pole of the asteroid and the position of the facet in the asteroid.

For particles large when compared to the wavelength, the single scatter albedo can be calculated with a geometric optics approximation as a function of the optical constants of the material (which in turn also depend on the wavelength) and the size of particle.

In principle the phase parameters depend on the properties of the material through the optical constants (Hapke 2012b), and as

consequence these parameters should also depend on the wavelength. In order to separate the effects of the phase parameters on the final spectra, however, we will consider here that they are independent of wavelength and related through Eq. 3. In order to simulate spectra with a $1\mu\text{m}$ band we use optical constants for pure olivine ($F_a=1$) derived by Trang et al. (2011), with particle with diameters $d = 50\mu\text{m}$. We can now compute bi-directional reflectance spectra for a range of phase parameter and geometries and calculate the resulting *Slope* and band depth. We will consider the cases of materials that are backward-scattering ($b = 0.2$), forward-scattering ($b = 0.7$) as well as a material with intermediate properties ($b = 0.5$).

3.1. Plane slab

Figure 5 shows how the bi-reflectance spectra of a slab varies as function of phase angle and phase parameters. Here we are not considering neither macroscopic roughness or opposition effect. Figure 5 (a) and (b) shows the normalized bi-directional reflectance spectra for phase angles between 0° and 60° using, respectively, $b = 0.2$ and $b = 0.7$. It is clear here that the shape of spectra changes very little with phase angle for backward-scattering materials, while the variations are more considerable for forward-scattering surfaces. Figure 5 (c) shows how these variations affect the slope of the spectra; the band depth variations are highly correlated with variations of the slope. For a backward-scattering surface ($b = 0.2$) the slope is anti-correlated with phase angle, decreasing smoothly with increasing phase angles. A similar behavior is observed for materials with $b = 0.5$. For forward-scattering material ($b = 0.7$), on the other hand, the slope increases with phase angle until $g \approx 30^\circ$, but eventually start decreasing after $g \approx 40^\circ$.

Therefore, results obtained for a slab suggest that, for phase angles up to 30° , a positive correlation of slope and band depth will happen for forward-scattering material, while for backward-scattering material and materials with intermediate properties those parameter will be anti-correlated with phase angle.

3.2. Shape effects

In order to understand how the shape of the body may affect these results we here model the bi-reflectance spectra of ellipsoids, which can be described by three axis a_1 , a_2 , and a_3 , considering the case where the larger axis $a_1 = 1$ and $a_2 = a_3$, such that the shape is completely described by the a_2/a_1 ratio. Also, to fully describe the orientation of each facet of the spheroid with respect to the observer and the Sun it is necessary to specify the direction of the rotation pole of the body, as well as the rotational angle from a fixed position on the body to the line of sight. We consider here the case where the rotation pole is perpendicular to the line of sight and that the rotational angle is zero in one direction along the larger axis of the spheroid.

Figure 6 shows the same plots as Fig. 5 except that now we are considering a nearly spherical ellipsoid ($a_2/a_1 = 0.9$) seen at a rotational angle of 10° . For the back-scattering material the spectral slope shows no correlation with phase angle, remaining essentially constant for phase angles up to 60° . In contrast, forward-scattering materials show an increase of the spectral slope up to $g \approx 40^\circ$ that is steeper than what is observed for a slab, with the spectral slope becoming essentially constant for larger phase angles. The same qualitative behavior is now seen for $b = 0.5$, but with much less steep gradient before $g \approx 40^\circ$. Considering now an extremely elongated body with $a_2/a_1 = 0.2$

(Fig. 7) the variations of shape of the spectra with phase angle are more pronounced when compared with the slab for both backward- and forward-scattering materials. The spectral parameters show an anti-correlation for phase angles smaller than 10° , which becomes a positive correlation up to $g \approx 50^\circ$, and then again turns to anti-correlation for larger phase angles. The positive correlations become more steep as one goes from backward-scattering to forward-scattering materials.

These qualitative behaviors are only slightly modified by the addition of macroscopic roughness and opposition effects. Figure 8 shows the behavior of the spectral slope with phase angle for mean surface slopes from $\bar{\theta} = 0^\circ$ to $\bar{\theta} = 50^\circ$, considering $b = 0$ and different body shapes. The overall effect of the macroscopic roughness is to increase slightly the gradient of the spectral slope with phase angle (more noticeably at larger phase angles) and the magnitude of this increase becomes more important for more elongated bodies. The effect of the shadow-hiding opposition effect is shown in Figure 9. This effect causes a decrease in the observed spectral slope that becomes more important at small phase angles and results in an overall increase in the gradient of the spectral slope with respect to the phase angle.

It is also important to consider how the shape of the spectra is affected by the changing in rotational aspect. Figure 10 shows, for different a_2/a_1 ratios, the variation of spectral slope with rotational angle, for a phase angle fixed at $g = 20^\circ$. The overall behavior of both parameters with rotational angle do not depend whether the material is forward- or backward-scattering but, as should be expected, depend very strongly on a_2/a_1 , being negligible for a near-spherical and quite significant for the elongated bodies. For both parameters, the amount of the variation with rotation can be comparable to the variation due to changes in phase angle, depending on the scattering properties of the material and the shape of the body.

4. Discussion

From the discussions in the previous section it is clear that the variations of spectral slope and band depth that should influence the dependence of the taxonomic classification of asteroids with phase angle presented in section 2 are controlled primarily by the phase function parameters, but that the shape of the body is also an important source of variation. For a plane-parallel medium the dependence of the spectral slope with phase angle goes from anti-correlation for backward-scattering materials to positive correlation for forward-scattering materials. However, no anti-correlation is seen once a convex shape is assumed. In this case what is observed is essentially no correlation between spectral slope and phase angle for more extreme backward-scattering surfaces, and progressively more steep positive correlations as the surface becomes more forward-scattering. Also, more elongated bodies would in principle show steeper gradients, and the addition of opposition and macroscopic roughness effects would also produce a steeper phase reddening. All these effects are compatible with the observed dependency of taxonomic classification with phase angle, and with the fact that most of SDSS asteroids with observations on multiple phase angles present either a positive correlation of the spectral slope with phase angle or no correlation; the latter case would be consistent with more backward-scattering surfaces. It is also possible to understand the existence of objects which show anti-correlation of spectral slope and band depth with phase angle as a consequence of the dependence that these parameters have on the rotational and aspect angle of each observations. This may happen

since for more elongated bodies the variation of those parameters with rotational angle is comparable with the magnitude of the variation due to changes in the phase angle of the observations. Since the asteroid were observed by SDSS at essentially random configurations in terms of rotational, aspect and phase angles the combined effects of these parameter on the observed spectra for more elongated bodies could produce the observed negative correlations, as well as absence of correlations.

5. Conclusions

In this paper we have analyzed the influence of the solar phase angle on the taxonomic classification of SDSS observations of asteroids. The main results here are:

1. **The distribution in phase angle of SDSS observations of asteroids classified in most of the major taxonomic classes shows trends consistent with an increase in spectral slope and band depth with increasing phase angle.**
2. **Although the majority of asteroids with SDSS observations over multiple phase angles show positive correlation between both spectral slope and band depth and phase angle, there are many asteroids for which those parameters have no correlation and even negative correlations with phase angle.**

Next we used Hapke models to understand the effects of the parameters related to surface texture and optical properties on the dependence of the spectral slope with phase angle. To also understand how the shape of the asteroids might influence that dependence, we applied those models to a plane slab and to facets of ellipsoids with different axial ratios. The first case is equivalent to spectra of particulate samples measured in laboratories while the later simulates spatially integrated observations of asteroids. Main results here are:

- **The dependence of the spectral slope with phase angle is most affected by the parameters of the phase function. The amount of reddening with phase angle increases as the material becomes more forward scattering, while surfaces that show extreme backward scattering may present negative correlation between spectral slope and phase angle.**
- **The shape of the target also affects strongly the dependence between spectral slope and phase angle:**
 - **The amount of phase reddening increases for more elongated bodies.**
 - **Ellipsoids with extreme backward scattering surfaces show, at most, no correlation between spectral slope and phase angle, instead of the negative correlation seen for plane slabs.**
 - **For elongated bodies the measured spectral slope is also a function of the aspect and rotational angles of the observation, and the variation in spectral slope due to changes in the rotational angle is comparable to the variation due to phase angle.**
- **Both opposition effects and macroscopic roughness contributes to increase the phase reddening, and together they may result in an increase in the spectra slope with phase angle even for a sphere covered in backward scattering material.**

We have then that bodies with ellipsoidal shape affected by macroscopic roughness and oppositions effects will in general produce spectra whose slope increases with the phase

angle of the observation. This fact alone suffices to explain what is described in item 1: objects whose spectral characteristics put them on the border between taxonomic classes might be classified as one or other depending on the observational circumstances. Also, the absence of correlation and anti-correlation between spectral slope and phase angle that is seen in part of the sample could be explained by shape effects and the random observational aspect of the observations (although observational problems on some cases could play a part here).

Therefore, the observational circumstances and shape of the body may affect the spectral parameters that are related to taxonomic classifications. For most asteroids, the magnitude of these effects should be small, but could change the taxonomic classification of observations in some instances. Attempts to correct for those effects in a proper way would require knowledge about not only the scattering properties of the material on the surface of the bodies but also about their shapes and rotation poles, parameters that are not known at this point for the vast majority of the asteroids with SDSS observations. In the end, however, this kind of correction is not really necessary for most of the meaningful uses of taxonomy. Although phase and shape effects can blur the lines between taxonomic classes, it must be realized that those lines, although useful as references, lack any strict meaning in terms of defining the mineralogical composition of an asteroid. It suffices then to take the effects shown in this paper into account when trying to interpret the taxonomic classification of asteroids in any given context.

Acknowledgements. J.M.C would like to thank CNPq and CAPES for supporting this work through diverse fellowships and grants. J.A.G.D. would like to thank to CAPES for supporting his work with a PhD fellowship.

References

- Carvano, J. M., Hasselmann, P. H., Lazzaro, D., & Mothé-Diniz, T. 2010, A&A, 510, A43
- Cellino, A., Bus, S. J., Doressoundiram, A., & Lazzaro, D. 2002, Asteroids III, 633
- DeMeo, F. E., Binzel, R. P., Carry, B., Polishook, D., & Moskovitz, N. A. 2014, Icarus, 229, 392
- DeMeo, F. E. & Carry, B. 2013, Icarus, 226, 723
- Gradie, J. & Veverka, J. 1986, Icarus, 66, 455
- Hapke, B. 1984, Icarus, 59, 41
- Hapke, B. 1986, Icarus, 67, 264
- Hapke, B. 1993, Theory of reflectance and emittance spectroscopy
- Hapke, B. 2002, Icarus, 157, 523
- Hapke, B. 2008, Icarus, 195, 918
- Hapke, B. 2012a, Icarus, 221, 1079
- Hapke, B. 2012b, Theory of reflectance and emittance spectroscopy, 2nd edition
- Hasselmann, P. H., Carvano, J. M., & Lazzaro, D. 2011, NASA Planetary Data System, 145
- Jasmim, F. L., Lazzaro, D., Carvano, J. M. F., Mothé-Diniz, T., & Hasselmann, P. H. 2013, A&A, 552, A85
- Jurić, M., Ž. Ivezić, & Lupton, R. H. 2002, in Bulletin of the American Astronomical Society, Vol. 34, Bulletin of the American Astronomical Society, 1172–+
- Millis, R. L., Bowell, E., & Thompson, D. T. 1976, Icarus, 28, 53
- Moskovitz, N. A., Jedicke, R., Gaidos, E., et al. 2008, Icarus, 198, 77
- Mothé-Diniz, T., Carvano, J. M. á., & Lazzaro, D. 2003, Icarus, 162, 10
- Mothé-Diniz, T., Roig, F., & Carvano, J. M. 2005, Icarus, 174, 54
- Reddy, V., Dunn, T. L., College, C., et al. 2015, arXiv:1502.05008
- Roig, F. & Gil-Hutton, R. 2006, Icarus, 183, 411
- Sanchez, J. A., Michelsen, R., Reddy, V., & Nathues, A. 2013, Icarus, 225, 131
- Tholen, D. J. & Barucci, M. A. 1989, in Asteroids II, ed. R. P. Binzel, T. Gehrels, & M. S. Matthews, 298–315
- Trang, D., Lucey, P. G., & Gillis-Davis, J. J. 2011, in Lunar and Planetary Science Conference, Vol. 42, Lunar and Planetary Science Conference, 2745

Capítulo 7

Conclusões e perspectivas futuras

A motivação que começou este trabalho foi uma pergunta muito simples, a forma do asteroide afeta seu espectro observado? Com isso, as quantidades que se inferem, como a fração de composição de minerais presentes, como no caso de asteroides cuja composição superficial é dominada por olivina e piroxênio. A primeira tarefa foi escolher espectros de meteoritos HED da base de dados do RELAB. Estes espectros foram escolhidos cuidando que as amostras foram preparadas da forma mais homogênea possível. Segundo, se programou o modelo de refletância bidirecional de [Hapke \(1993, 2012b\)](#), em Python, para inverter os espectros de refletância dos meteoritos e assim determinar suas constantes óticas. Modelos avançados de refletância precisam de constantes óticas para determinar as propriedades superficiais de solos, então era preciso antes de mais nada ter constantes óticas destes meteoritos para estudar o efeito de forma sobre o espectro. Na literatura há vários trabalhos que determinam constantes óticas por inversão de espectros de refletância de meteoritos e minerais mas, estes parâmetros óticos não são obtidos de forma rigorosa. A tarefa de determinar constantes óticas por inversão do espectro de refletância é um problema em aberto na literatura, mas podemos dizer que fizemos um grande progresso sobre este problema. Isto se pode apreciar uma vez que os parâmetros óticos determinados reproduzem de forma satisfatória os espectros observados de nossa sub-amostra de meteoritos HED. As maiores diferenças entre os espectros gerados e os observados são para as amostras com distribuição de tamanho de grão entre $0 - 25 \mu\text{m}$ e $250 - 500 \mu\text{m}$. A razão disto ainda não é muito clara, por exemplo, para o primeiro intervalo de tamanho de grão, foi proposto que as aproximações para as eficiências de espalhamento e absorção não são corretas, já que estas são determinadas quando as partículas são muito maiores que o comprimento de onda da radiação incidente, onde a ótica geométrica é válida. Se isto é verdade, então substituindo as expressões das eficiências por umas mais adequadas para esta

região o ajuste do espectro deve melhorar. Para o último intervalo de tamanho de grão, temos duas suposições, (1) o modelo de refletância tem um problema se substituir a distribuição de tamanho de grão por uma partícula de tamanho efetivo, (2) que o fator de transmissão interna, chamado de modelo de exponencial com espalhadores internos, deve de ser mudado pelo modelo de exponencial dupla, que tem mais uma variável livre.

Voltando para o efeito de forma, tendo as constantes óticas determinadas gerou-se espectros sintéticos considerando diferentes formas elipsoidais, e para vários ângulos de fase. Não encontramos variação da posição dos mínimos das bandas nem câmbios significativos do parâmetro BAR, a única variação significativa que observou-se foi na inclinação do espectro. Observou-se que a inclinação diminui conforme o elipsóide se alonga através de seu eixo de rotação, e se incrementa quando o elipsóide se alonga através de seu equador. A variação da inclinação para o ultimo caso é maior que para o primeiro caso. Sendo a inclinação obtida para uma geometria plano-paralela maior para ambos casos. É possível que objetos que tenham uma complexa rotação apresentem uma combinação da variação da inclinação citados acima.

Como se mostrou no artigo sobre efeito de fase e forma sobre a classificação taxonômica de asteroides, observou-se que uns bons números de asteroides mostram que a inclinação de seu espectro tende a ser maior quando se incrementa o ângulo fase. Isto também observou-se para espectros gerados com efeito de forma, mas a variação da inclinação por ângulo de fase tem uma dependência com a forma do objeto. Para objetos com alongação através de seu eixo de rotação, a variação da inclinação por ângulo de fase é maior conforme o objeto é mais alongado, o contrario acontece com objetos que tem alongação através de seu equador. Por outro lado, a variação da inclinação para um espectro gerado para uma geometria plano-paralelo em função do ângulo de fase é constante até os 40 graus, depois a inclinação diminui. Observou-se também que para um espectro com efeito de forma a variação da inclinação em função do ângulo de fase, em média é maior a 50% que para um espectro gerado sem considerar o efeito de forma. Este último ponto é interessante porque espectros obtidos das amostras de meteoritos no laboratório mostrariam uma menor variação da inclinação por ângulo de fase, que os espectros de seu asteroide análogo. O modelo que empregado para gerar os espectros com efeito de forma não considerou a rugosidade macroscópica nem espalhadores internos, mas assim, sem estes refinamentos da para ver uma dependência da inclinação com a forma do objeto.

Com relação aos efeitos de ângulo de fase e forma sobre a classificação taxonômica, viu-se primeiro que existe uma correlação entre a inclinação do espectro e o ângulo de fase, mas ainda

se tem bom número de asteroides observados que têm uma anticorrelação ou não apresentam anticorrelação alguma. Modelando espectros para estudar os parâmetros no modelo de Hapke que dependem da geometria de observação encontramos que, para superfícies que apresentam espalhamento de baixo a moderado em ângulo de fase a variação da inclinação tem uma anticorrelação com o ângulo de fase, e esta variação tem uma dependência com a forma do objeto. Para um objeto de esférico a muito alongado, não se observa correlação alguma, porém para um objeto quase esférico se tem correlação a partir de 10° , aproximadamente. Não observamos uma forte dependência da variação da inclinação quando se considera efeitos de rugosidade ou efeitos de oposição. Para um objeto muito alongado a inclinação tem uma dependência com a fase rotacional do objeto, onde para uma fase rotacional maior a 20° a inclinação se incrementa com a fase rotacional. A classificação taxonômica de asteroides pode ser afetada pelos efeitos aqui estudados. Então, é importante tomar em consideração estes efeitos ao momento de interpretar classificação taxonômica. Os dois efeitos observacionais são: o efeito de ângulo de fase e o efeito de forma; o primeiro é uma medida direta, porém o segundo precisa de muitas observações para conhecer a forma e a direção do pólo o objeto. Por agora, só se tem um pequeno número de asteroides com forma determinada. O outro precisa de um modelo de refletância, como o modelo de Hapke, para se conhecer as propriedades superficiais.

Como perspectivas futuras, temos que aprimorar o cálculo de constantes óticas incluindo uma função para a distribuição de tamanhos de partículas e o efeito de rugosidade macroscópica, que como se viu no teste de inversão, a rugosidade macroscópica melhora o ajuste para intervalos de tamanho de grão entre $25 - 250 \mu\text{m}$. Também verificar se o fator de transmissão interna chamado de exponencial dupla melhora o ajuste para amostras de grão entre $250 - 500 \mu\text{m}$. Mas tudo assim, a implementação atual é útil para o estudo de corpos do Sistema Solar. Com a implementação final se calculara a partir de espectros RELAB constantes óticas para tantos tipos de meteorito quando possível, e usar isto para estudar de maneira mais abrangente efeitos de forma sobre taxonomias e métodos de determinação de composição.

Referências Bibliográficas

- John B. Adams. Visible and near-infrared diffuse reflectance spectra of pyroxenes as applied to remote sensing of solid objects in the solar system. *J. Geophys. Res.*, 79:4829–4836, 1974.
- Donald Bogard and Daniel Garrison. Ar-ar impact heating ages of eucrites and timing of the lhb. *40th Lunar and Planetary Science Conference*, 2009.
- Craig F. Bohren and Donald R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, volume 1. John Wiley & Sons, Inc., 1 edition, 1998.
- Audrey Bouvier, Janne Blichert-Toft, Frédéric Moynier, Jeffrey D Vervoot, and Francis Albarède. Pb-pb dating constraint on the accretion and cooling history of chondrites. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 71:1583–1604, 2007.
- Roger G. Burns. Crystal field spectra and evidence of cation ordering in olivine minerals. *American Mineralogist*, 55:1608–1632, 1970a.
- Roger G. Burns. *Mineralogical Applications of Crystal Field Theory*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2nd edition, 1993.
- Schelte John Bus. *Compositional structure in the asteroid belt: Result of a spectroscopic survey*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1999.
- J. M. Carvano, P.H. Hasselmann, D. Lazzaro, and T. Mothé-Diniz. Sdss-based taxonomic classification and orbital distribution of main belt asteroids. *A&A*, 510, A43, 2010.
- C. R. Chapman, D. Morrison, and B. Zellner. Surface properties of asteroids - a synthesis of polarimetry, radiometry, and spectrophotometry. *Icarus*, 25:104–130, 1975.
- Eduard A. Cloutis, Michael J. Gaffey, Timothy L. Jackowsky, and Kevin L. Reed. Calibration and phase abundance, compositions, and particle size distribution for olivine-orthopyroxene mixtures from reflectance spectra. *J. Geophys. Res.*, 91(B11):11,641–11,653, 1986.

- G. C. de Elía and A. Brunini. Collisional and dynamical evolution of the main belt and near population. *A&A*, pages 1159–1177, 2007.
- W.A. Deer, R.A. Howie, and J. Zussman. *An Introduction to the Rock-Forming Minerals*. John Wiley, 1966.
- P. Farinella, Ch. Froeschlé, R. Gonczi, G. Hahn, A. Morbidelli, and G. Valsecchi. Asteroid falling onto the sun. *Nature*, 371:315–317, 1994.
- G. Foderá, A. Manara, and P. Sicoli. Giuseppe piazzi and the discovery of ceres. *Asteroid III*, pages 17–24, 2002.
- G. W. Fowler, J. J. Papike, M. N. Spilde, and C. K. Shearer. Diogenites as asteroidal cumulates: Insights from orthopyroxene major and minor element chemistry. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 84:3921–3929, 1994.
- B. Gladman, P. Michel, and Ch. Froeschlé. the near-earth object population. *Icarus*, 146: 176–189, 2000.
- Monica M. Grady. *Catalogue of Meteorites*. Cambridge University Press, 5th edition, 9 2000.
- Bruce Hapke. Bidirectional reflectance spectroscopy. 1. theory. *Journal of Geophysical Research*, 86:4571–4586, 1981.
- Bruce Hapke. *Theory of Reflectance and Emittance Spectroscopy*. Cambridge University Press, Cambridge,UK, 1993.
- Bruce Hapke. Scattering and diffraction of light by particles in planetary regoliths. *J.Quant.Spectrosc.Radia.Transfer*, 51(5):565–581, 1999.
- Bruce Hapke. Bidirectional reflectance spectroscopy: 5. the coherent backscatter opposition effect and anisotropic scattering. *Icarus*, 157:523–534, 2002.
- Bruce Hapke. Bidirectional reflectance spectroscopy 6. effects of porosity. *Icarus*, 195:918–926, 2008.
- Bruce Hapke. Bidirectional reflectance spectroscopy 7 the single particle phase function hockey stick relation. *Icarus*, 221:1079–1083, 2012a.
- Bruce Hapke. *Theory of Reflectance and Emittance Spectroscopy*. Cambridge University Press, Cambridge,UK, 2012b.

- Bruce Hapke and Eddie Wells. Bidirectional reflectance spectroscopy: 2. experiments and observations. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 86:3055–3060, 1981.
- Paul Helfenstein and Michel K. Shepard. Testing the hapke photometric model: Improved inversion and the porosity correction. *Icarus*, 215:81–100, 2011.
- L.G. Henyey and J.L. Greenstein. Diffuse radiation in the galaxy. *Astrophys. J.*, 93:70–83, 1941.
- Thomas Hockey, Virginia Trimble, Th.R. Williams, K. Bracher, R. Jarrell, J.D. Marché, and F.J. Ragep. *Biographical Encyclopedia of Astronomers*. Springer Science, 1 edition, 2007.
- T.R. Ireland and B. Fegley. The solar system’s earliest chemistry: Systematics of refractory inclusions. *Intl. Geol. Rev.*, 42:865–894, 2000.
- Flávia Luzia Jasmim. *Estudo da composição superficial de diversas classes de pequenos corpos*. PhD thesis, Observatório Nacional, 2013.
- Eric Jones, Travis Oliphant, Pearu Peterson, et al. SciPy: Open source scientific tools for Python, 2001. URL <http://www.scipy.org/>. [Online; accessed 2015-05-18].
- M. J. Krawczynski, L. T. Elkins-Tanton, and T. L. Grove. Petrology of olivine-diogenite mil03443,9: Constraints on eucrite parent body bulk composition and magmatic processes. *Lunas Planet. Sci.*, XXXIX, 2008.
- Kenneth Levenberg. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. *Quarterly of Applied Mathematics*, 2:164–168, 1944.
- Shuai Li and Lin Li. Radiative transfer modeling for quantifying lunar surface minerals, particle size, and submicroscopic metallic fe. *J. Geophys. Res.*, 116, 2011.
- Shuai Li and Ralph E. Milliken. Estimating the modal mineralogy of eucrite and diogenite meteorites using visible-near infrared reflectance spectroscopy. *Meteorites & Planetary Science*, 11:1821–1850, 2015.
- Paul G. Lucey. Model near-infrared optical constant of olivine and pyroxene as a functions of iron content. *J. Geophys. Res.*, 103:1703–1713, 1998.
- Donald W. Marquardt. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *SIAM J. Appl. Math.*, 11:431–441, 1963.

- A. McGuire. *Experimental Investigation of Light Scattering by Large Irregular Particles*. PhD thesis, University of Pittsburgh, 1993.
- Audrey McGuire and Bruce Hapke. An experimental study of light scattering by large, irregular particles. *Icarus*, 113:134–155, 1995.
- R. L. Millis, E. Bowell, and D. T. Thompson. UBV photometry of asteroid 433 eros. *Icarus*, 28: 53–67, 1976.
- John F. Mustard and Carlé M. Pieters. Photometric phase functions of common geologic minerals and applications to quantitative analysis of mineral mixture reflectance spectra. *J. Geophys. Res.*, 94:13,619–13,634, 1989.
- Antonino B. Pluchino, S.S. Goldberg, J.M. Dowling, and C.M. Randall. Refractive-index measurements of single micron-sized carbon particles. *Applied Optics*, 19:3370–3372, 1980.
- Olga P. Popova, Peter Jenniskens, Vacheslav Emel’yanenko, Anna Katarshova, Eugeny Biryukov, et al. Chelyabinsk airburst, damage assessment, meteorite recovery, and characterization. *Science*, 342(6162):1069–1073, 2013.
- A. O. Ribeiro, F. Roig, M. N. De Prá, J. M. Carvano, and S. R. DeSouza. Dynamical study of the atira group of asteroids. *Monthly Notices*, 458:4471–4476, 2016.
- C.T. Russell, C.A. Raymond, A. Coradini, H.Y. McSween, M.T. Zuber, A. Nathues, M.C. De Sanctis, R. Jaumann, A.S. Konopliv, F. Preusker, S.W. Asmar, R.S. Park, R. Gaskell, H.U. Keller, S. Mottola, T. Roatsch, J.E.C. Scully, D.E. Smith, P. Tricarico, M.J. Toplis, U.R. Christensen, W.C. Feldman, D.J. Lawrence, T.J. McCoy, T.H. Prettyman, R.C. Reedy, M.E. Sykes, and T.N. Titus. Dawn at Vesta: Testing the protoplanetary paradigm. *Science*, 336 (684–686), 2012.
- Richard O. Sack, William J. Azeredo, and Michael E. Lipschutz. Olivine diogenites: The mantle of the eucrite parent body. *Geochim. Cosmochim.*, pages 1111–1120, 1991.
- Juan A. Sanchez, Vishnu Reddy, Andreas Nathues, Edward A. Cloutis, and Paul Mann. Phase reddening on near-earth asteroids: Implications for mineralogical analysis, space weathering and taxonomic classification. *Icarus*, 220:36–50, 2012.
- M.K. Shepard, B.A. Campbell, M.H. Bulmer, T.G. Farr, L.R. Gaddis, and J.J. Plaut. The roughness of natural terrain: A planetary and remote sensing perspective. *J. Geophys. Res.*, 106:777–795, 2001.

- Yuriy Shkuratov and Larissa Starukhina. A model of spectra albedo of particulate surfaces: Implications for optical properties of the moon. *Icarus*, 137:235–246, 1999.
- Yuriy Shkuratov, Sergey Bandarenko, Vadym Kaydash, Gorden Videen, Olga Muñoz, and Hester Volten. Photometry and polarimetry of particulate surfaces and aerosol particles over a wide range of phase angles. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 106:487–508, 2007.
- D. J. Tholen and M. A. Barucci. Asteroid taxonomy. *Asteroid II*, pages 298–315, 1989.
- David James Tholen. *Asteroid taxonomy from cluster analysis of photometry*. PhD thesis, University of Arizona, Tucson, 1984.
- Faith Vilas and Michael J. Gaffey. Phyllosilicate absorption features in main-belt and outer-belt asteroid reflectance spectra. *Science*, 246:790–792, 1989.
- Johan Villeneuve, Marc Chaussidon, and Guy Libourel. Homogeneous distribution of ^{26}Al in the solar system mg isotopic compositions of chondrules. *Science*, 325(5943):985–988, 2009.
- M. Wadhwa and S.S. Russell. Timescales of accretion and differentiation in the early solar system. *In Protostars and Planets IV*, pages 995–1018, 2000.
- Akira Yamaguchi, G. Jeffrey Taylor, and Klaus Keil. Global crustal metamorphism of the eucrite parent body. *Icarus*, 124:97–112, 1996.
- Maria T. Zuber, Harry Y. McSween Jr., Richard P. Binzel, Linda T. Elkins-Tanton, Alexander S. Konopliv, Carle M. Pieters, and David E. Smith. Origin, internal structure and evolution of 4 vesta. *Space Sci. Rev.*, 163:77–163, 2011.