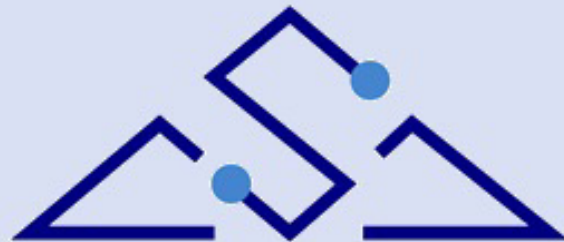
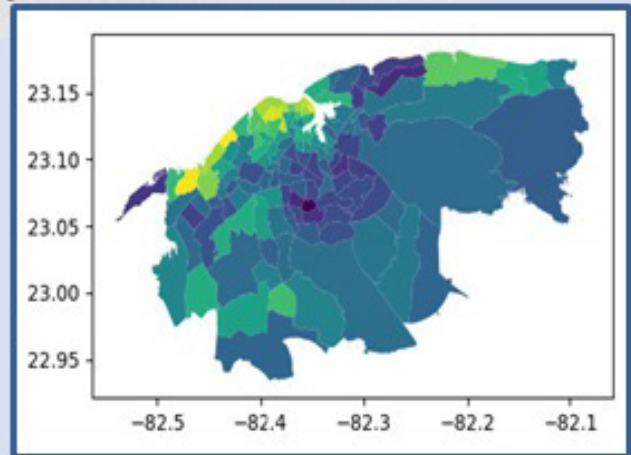
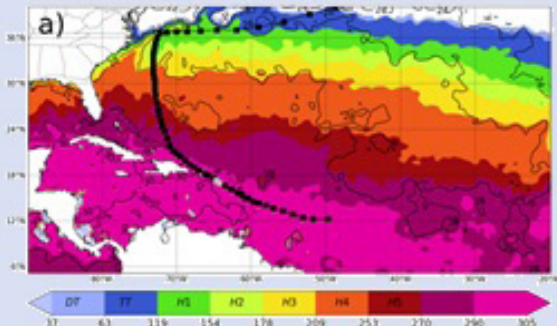


FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

Sociedad Cubana de Física
y Facultad de Física,
Universidad de La Habana

VOL.38 No.2
DICIEMBRE, 2021



SISTEMAS COMPLEJOS Y FÍSICA ESTADÍSTICA

EDITOR

E. ALTSHULER
Facultad de Física, Universidad de la Habana
ealtshuler@fisica.uh.cu

EDICIÓN ELECTRÓNICA

J. J. GONZÁLEZ, C. GANDARILLA
Facultad de Física, Universidad de la Habana
jjgonzalez@fisica.uh.cu, cgandarilla@fisica.uh.cu

E. MARTÍNEZ
NTNU, Norway
martinez.etien@gmail.com

O. ALMORA
University Jaume I
almore@uji.es

D. MIRAVET
University of Ottawa
dmiravet@uottawa.ca

EDITORES ASOCIADOS

A. J. BATISTA-LEYVA, G. ROJAS-LORENZO
INTEC, La Habana
abatista@instec.cu, german@instec.cu

W. BIETENHOLZ
UNAM, México
wolbi@nucleares.unam.mx

J. O. FOSSUM
NTNU, Noruega
Jon.fossum@ntnu.no

L. H. GREENE
National Magnetic Lab, U.S.A
lhgreene@magnet.fsu.edu

J. -P. GALAUP
Lab. A. Cotton (CNRS) & Univ. Paris-Sud
Jean-pierre.galaup@lac.u.-psud.fr

J. LLOVERA
CUJAE, La Habana
llovera@electronica.cujae.edu.cu

O. de MELO, R. MULET
Facultad de Física, Universidad de La Habana
omelo@fisica.uh.cu, mulet@fisica.uh.cu

P. MUNÉ
Facultad de Ciencias, Universidad de Oriente
mune@cnt.uo.edu.cu

T. PÖSCHEL
University Erlangen-Nuremberg
thorsten.poeschel@fau.de

E. RAMÍREZ-MIQUET
ermiquet@gmx.com

T. SHINBROT
Rutgers University
shinbrot@soemail.rutgers.edu

C. A. ZEN-VASCONCELOS
Univ. Federal Rio Grande do Sul
cesarzen@cesarzen.com

COORDENADAS

- 64 **SISTEMAS COMPLEJOS Y FÍSICA ESTADÍSTICA: DESDE ESTOCOLMO HASTA LA HABANA**
[COMPLEX SYSTEMS AND STATISTICAL PHYSICS: FROM STOCKHOLM TO HAVANA]
A.Lage-Castellanos

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 66 **OPTIMIZING THE DILUTION PROTOCOL IN CONTINUOUS CELL CULTURES**
[OPTIMIZACIÓN DEL PROTOCOLO DE DILUCIÓN EN CULTIVOS CELULARES CONTINUOS]
B. A. Pérez-Fernández, R. Mulet
- 77 **HURRICANE MAXIMUM POTENTIAL INTENSITY AND GLOBAL WARMING**
[LA INTENSIDAD POTENCIAL MÁXIMA DE LOS HURACANES Y EL CALENTAMIENTO GLOBAL]
A. Pérez-Alarcón, J.C. Fernández-Alvarez, O. Díaz-Rodríguez
- 85 **MODELO DE INTENSIDAD POTENCIAL MÁXIMA DE HURACANES**
[HURRICANE MAXIMUM POTENTIAL INTENSITY MODEL]
A. Pérez-Alarcón, J.C. Fernández-Alvarez, O. Díaz-Rodríguez
- 94 **ELECTRON CORRELATION EFFECTS AND DIPOLAR/OCTUPOLAR CONTRIBUTION ON THE FIRST HYPERPOLARIZABILITY OF PUSH-PULL OLIGOMER SYSTEMS**
[EFECTOS DE CORRELACIÓN ELECTRÓNICA Y CONTRIBUCIÓN DIPOLAR / OCTUPOLAR EN LA PRIMERA HIPERPOLARIZABILIDAD DE SISTEMAS PUSH-PULL OLIGÓMEROS]
N. S. Labidi
- 103 **MORFOLOGÍA DEL GRANO EN PIEZOCERAMICAS $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$ OBTENIDAS MEDIANTE EL PRECURSOR NaNbO_3**
[GRAIN MORPHOLOGY IN $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$ PIEZOCERAMICS OBTAINED BY NaNbO_3 PRECURSOR]
J.F. Rebellón-Watson, R. López-Noda, J. Fuentes, J. Portelles
- 108 **THE BETA⁺-DECAY IN PROTON HALO NUCLEUS**
[LA DESINTEGRACIÓN BETA⁺ EN NÚCLEOS CON HALO DE PROTONES]
W. S. Hwash
- 112 **AMPLIACIÓN DE LAS POSIBILIDADES DEL SISTEMA HPCI-1 PARA EL ESTUDIO DEL MOVIMIENTO DE UN PÉNDULO SIMPLE REAL EN OSCILACIONES PEQUEÑAS**
[EXPANDING THE POSSIBILITIES OF THE HPCI-1 SYSTEM FOR THE STUDY OF A REAL SIMPLE PENDULUM IN SMALL OSCILLATIONS]
A. Hernández-Ferreira
- 120 **AMPLIACIÓN DE LAS POSIBILIDADES DEL SISTEMA HPCI-1 PARA EL ESTUDIO DE LOS CIRCUITOS DE CORRIENTE ALTERNA**
[EXPANDING THE POSSIBILITIES OF THE HPCI-1 SYSTEM FOR THE STUDY OF ALTERNATING CURRENT CIRCUITS]
A. Hernández-Ferreira
- PARA FÍSICOS Y NO FÍSICOS**
- 128 **THE 2021 PHYSICS NOBEL PRIZE: CLIMATE AND DISORDER**
[EL PREMIO NOBEL DE FÍSICA DE 2021: CLIMA Y DESORDEN]
R. Mulet
- 132 **FROM PILES OF GRAINS TO PILES OF VORTICES**
[DE LAS PILAS DE GRANOS A LAS PILAS DE VÓRTICES]
E. Altshuler
- 138 **NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS**

OBITUARIOS

- 140 **T. JACINTO CHUY RODRÍGUEZ (21 DICIEMBRE, 1947 - 5 AGOSTO, 2021)**
M. Iturralde
- 141 **E. VEGA (16 FEBRERO, 1944 - 15 AGOSTO, 2021)**
M. H. Calviño
- 142 **J. RAVELO TRIANA (25 NOVIEMBRE, 1930 - 27 AGOSTO, 2021)**
R. A. Díaz Delgado, J. L. Díaz Morera, V. L. Fajer Ávila
- 144 **M. D. GONZÁLEZ-POSADA DACOSTA (14 OCTUBRE, 1957 - 1 SEPTIEMBRE, 2021)**
H. E. Millán Vega

SISTEMAS COMPLEJOS Y FÍSICA ESTADÍSTICA: DESDE ESTOCOLMO HASTA LA HABANA

COMPLEX SYSTEMS AND STATISTICAL PHYSICS: FROM STOCKHOLM TO HAVANA

A. LAGE-CASTELLANOS

Director, Centro de Sistemas Complejos y Física Estadística

La definición de Sistemas Complejos resulta algo escurridiza. Cautelosamente, podríamos decir que son sistemas de muchas partes interactuantes que muestran propiedades emergentes. Se consideran sistemas complejos el clima, las redes biológicas, las pilas de arena, el movimiento colectivo de animales, y muchos otros: varios de estos temas se encuentran reflejados en artículos originales de este número de la Revista Cubana de Física. Conceptos de la física estadística y la termodinámica, como los macro y micro estados, las transiciones de fase y los estados estacionarios o transientes, encuentran paralelismo y utilidad en los sistemas complejos. El hecho de abarcar muchos temas –quizás demasiados– fue obviamente de gran ayuda para el comité Nobel, cuando hubo de conferir el galardón de Física de este año. Sugiero al lector que consulte el artículo sobre el tema que aparece en la sección “Física para físicos y no-físicos” en este número, donde Roberto Mulet ha hecho un loable esfuerzo por destilar los elementos verdaderamente unificadores que justifican la decisión del comité Nobel 2021.

I NUCLEACIÓN DE FASE

La semilla de los sistemas complejos en la Facultad de Física la siembran a finales de los años 90 los profesores Oscar Sotolongo y Ernesto Altshuler. Lo hacen en paralelo con la tendencia mundial de buscar nuevos espacios para la aplicación de conceptos físicos (entropía, desorden, leyes de escala, autosimilaridad) en ramas de la ciencia supuestamente más “blandas” que la Física convencional. En el caso de Cuba, un elemento que contribuiría a este cambio de paradigma era la propia crisis económica de los años 1990’s, y su impacto negativo en el desarrollo de la industria electrónica nacional. Soto y Altshuler comienzan a explorar campos fuera de la física del estado sólido, que era la tradición más fuerte en la Facultad de Física. El incipiente grupo de sistemas complejos publica importantes artículos sobre micro-gotas en emulsiones de combustible, y sobre la dinámica de avalanchas en vórtices superconductores y pilas granulares. A finales de la propia década, el entonces recién graduado Roberto Mulet realiza una estancia en el grupo del Profesor Giorgio Parisi –uno de los recién galardonados con el Nobel de Física– y se introduce en el mundo de las nuevas aplicaciones de la física estadística.

II TRANSIENTE

En los primeros años del siglo XXI este trío de investigadores, junto con colaboradores y estudiantes

internos y externos, constituyó la Cátedra de Sistemas Complejos “Henri Poincaré” (2002), primeramente, y luego el Grupo de Sistemas Complejos y Física Estadística. Su impacto se dejó sentir con fuerza en el quehacer de la Facultad. Se modernizaron los currículos de postgrado con asignaturas como Sistemas complejos, Análisis dimensional, Experimentos Avanzados de Física, Medios granulares y Sistemas desordenados, entre otros. Se hizo una amplia labor formativa sobre estudiantes de pregrado y postgrado con decenas de tesis defendidas. Se publicó una sustancial cantidad de artículos en revistas de alto impacto y amplio espectro; la temática ha estado fuertemente representada en términos de reconocimiento nacional e internacional. Notoriamente, en los últimos años, los intereses del grupo se han expandido hacia las ciencias de la vida, incluyendo el establecimiento de lazos científicos con centros del llamado “Polo Científico del Oeste de La Habana”, como el Centro de Inmunología Molecular y el centro de Neurociencias.

III CAMBIO DE ESTADO

Entre los temas explorados más recientemente por el grupo está la dinámica de sistemas desordenados en redes. Esto incluye desde modelos de átomos magnéticos, hasta modelos de redes de proteínas, cascadas metabólicas, modelos ecológicos, y... epidemiológicos. Desde 2015, investigadores del grupo intentaron impulsar una idea que en otras partes del mundo ya tenía resultados: usar los datos de la telefonía móvil para modelar la movilidad de las personas con fines diversos fines, entre ellos, el epidemiológico.

Esta idea, después de los lógicos contratiempos iniciales, ha contado con muchos apoyos: de la Organización Panamericana de la Salud, de ETECSA, de la dirección universitaria y, finalmente el interés directo del Ministerio de Comunicaciones y del gobierno mismo. Todo se fue dando en cadena, y visto en retrospectiva, podría decirse que más rápido que un estornudo. Lamentablemente, pronto los estornudos jugarían un rol protagónico en la vida del Centro, del país, y del planeta.

El proyecto estaba todavía en fase de prueba cuando en Wuhan (China) comienza a diseminarse una rara neumonía. La aparición del SARS-CoV2 justificó acelerar este proyecto, y en los primeros meses de la pandemia el entonces Grupo de Sistemas Complejos y Física Estadística pudo contribuir,

además de con modelación matemática, con análisis de patrones de movilidad que ponían a prueba la efectividad de las medidas implementadas en el país durante marzo y abril de 2021.

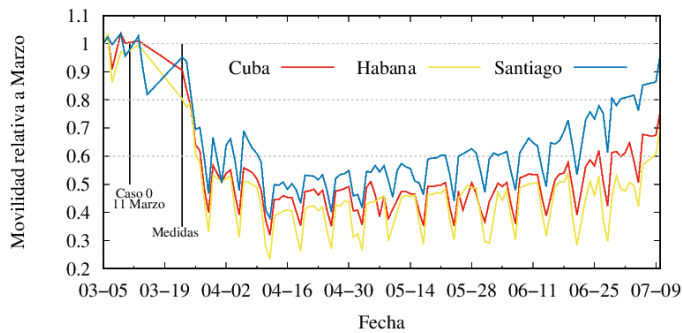


Figura 1. Movilidad de las personas en plena pandemia, determinada mediante la señal de los teléfonos celulares. Desde luego, la data se trabajó anónimamente.

Hacia mediados de 2020, el Viceministro de Comunicaciones Wilfredo González, quien ha impulsado el desarrollo de la llamada “Big Data” en el país como parte de la estrategia de gobierno para la modernización tecnológica y la solución de problemas basados en la ciencia, visitó la Universidad de La Habana, y discutió con su Rectora Miriam Nicado cómo consolidar los resultados que se iban obteniendo desde las facultades de Física y de Matemática y Computación. El 28 de diciembre de 2020 se firma la resolución ministerial que crea el Centro de Sistemas Complejos en la Facultad de Física, con cuatro objetivos fundamentales: investigación de primer nivel, colaboración dentro y fuera del espacio académico, formación de capital humano y coordinación de grupos afines.

El proyecto de análisis de los datos de movilidad ha seguido siendo una prioridad del centro durante este primer año. Muestra de su potencial ha sido la contribución dada al Proyecto de Movilidad Urbana Sostenible de la Dirección Provincial de Transporte de La Habana. En medio de la pandemia, la posibilidad de realizar encuestas de movilidad estaba muy limitada. Los datos de telefonía se usaron para comprender la dinámica de los flujos de población en la

ciudad, y se compararon con resultados de encuestas en los centros laborales. Sin embargo, los métodos basados en Big Data tienen el poder que les da la masividad de los datos y la disponibilidad diaria de estos. En la actualidad, se continúa trabajando en los análisis para el transporte y se prevé usar en otros temas, como la modelación de la epidemia de COVID-19.



CENTRO DE SISTEMAS COMPLEJOS

Figura 2. Logotipo del Centro de Sistemas Complejos y Física Estadística de la Facultad de Física, Universidad de La Habana.

Cuando se crea una institución científica, se potencia un grupo científico y se da por sentado que sus mejores años están por venir. El Centro de Sistemas Complejos y Física Estadística ha nacido con el reto de mantener y ampliar el impacto nacional e internacional de los resultados científicos que ha venido desarrollando un perseverante colectivo de investigadores de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana y sus colaboradores, a lo largo de décadas.

Hace muy poco, uno de esos pioneros pisó por vez primera los nuevos locales asignados al Centro. Hacía algunos años que no entraba al edificio de Física, cuyo largo y tortuoso proceso de renovación ha transcurrido –y aun transcurre– gracias a la extraordinaria obstinación y esfuerzo del claustro de la facultad. “Nunca pensé que esto se podía haber logrado” –nos dijo, con un brillo juvenil en los ojos. Aunque el Centro representa mucho más, el sólo hecho de provocar tales emociones hace que el esfuerzo haya valido la pena.

OPTIMIZING THE DILUTION PROTOCOL IN CONTINUOUS CELL CULTURES

OPTIMIZACIÓN DEL PROTOCOLO DE DILUCIÓN EN CULTIVOS CELULARES CONTINUOS

B. A. PÉREZ-FERNÁNDEZ^{a,b,†}, R. MULET^{a,c}

a) Group of Complex Systems and Statistical Physics, Physics Faculty, University of Havana, San Lázaro and L, 10400 La Habana, Cuba

b) Department of Applied Physics, Physics Faculty, University of Havana, San Lázaro and L, 10400 La Habana, Cuba; barbara.perez@fisica.uh.cu[†]

c) Department of Theoretical Physics, Physics Faculty, University of Havana, San Lázaro and L, 10400 La Habana, Cuba

[†] autor para la correspondencia

Recibido 8/6/2021; Aceptado 20/9/2021

Due to its potential impact on the biotech industry, continuous cell cultures have attracted great interest in recent years. However, this type of culture remains expensive and, in some aspects, inefficient. They are often optimized based on the empirical experience of the personnel involved in their development and maintenance, but this is time-consuming and leads to material and nutrients waste that could be reduced with a deeper understanding of the process. We propose an optimization method for continuous cell culture applying techniques from the theory of Optimum Control. As a proof of concept, we apply this method in a simple metabolic network that consumes glucose and secretes lactate. We predict the most appropriate behavior for the dilution rate that maximizes the cell density achieved in the steady state of the system.

Los cultivos celulares continuos han alcanzado un potencial impacto en la industria biotecnológica, lo que ha despertado un gran interés en la comunidad científica en los últimos años. Sin embargo, este tipo de cultivo sigue siendo caro y, en algunos aspectos, ineficiente. Comúnmente, el proceso de producción es optimizado en base a la experiencia empírica del personal involucrado en su desarrollo y mantenimiento, lo cual requiere mucho tiempo y conduce a desperdicios de materiales y nutrientes que podrían reducirse con una comprensión más profunda del proceso. Nosotros proponemos un método de optimización para cultivo celular continuo utilizando Teoría de Control. Como prueba de concepto, aplicamos este método a una red metabólica simple que consume glucosa y secreta lactato. Predicimos el comportamiento de la tasa de dilución que maximiza la densidad celular alcanzada en el estado estacionario del sistema.

PACS: Optimization, optimización 02,70. – c; theory optimal control, teoría de control 0,2,30.Yy; metabolism, metabolismo 87,17. – d

I. INTRODUCTION

Mammalian cell cultures are at the core of the productions of many therapeutic proteins and viral vaccines [1]. This has made it critical for pharmaceutical companies to improve their stability and efficiency. All the more reason when it comes to complex production systems such as continuous processes. In this case, fresh medium is continually added, while the culture liquid containing the leftover nutrients, metabolic end products, and toxic by-products is continuously removed to maintain the culture volume.

This type of large-scale production mode has attracted great interest in recent years. [2]. However, despite enormous advances in understanding and manipulation, continuous bioprocessing remains time consuming, expensive, and in some respects even an inefficient process [3].

In principle, we can distinguish four different ways to improve this process [4]: the selection of the strain, the formulation of a culture medium, the selection of critical parameters and the definition of the optimal protocol.

The strain is usually selected considering its resistance to changes in the environmental conditions of the culture and the possibility of manipulating them to obtain the products of interest to the industry [5]. The formulation of the culture media is even more delicate. To lower costs, the industry would like a medium that is as cheap as possible, but at the

same time it should be rich enough in nutrients to guarantee maximum growth [6] or protein production in the culture. On the other hand, setting parameters such as temperature, *pH* and oxygen concentration, is a very complex process. This generally requires prior knowledge of the values used for similar strains, or alternatively it is necessary to establish it after numerous experiments, implying a waste of time and resources [7].

But setting the values of specific parameters is not the only problem, the biggest difficulty is finding an efficient time-dependent protocol for each parameter. For example, in a perfusion system, controlling the dilution rate at the exponential stage of cell growth significantly influences the growth rate and the cell density achieved at steady state [8,9].

In this work, we will concentrate our efforts in this last problem: what is the proper protocol of dilution rate that maximizes the cell density of the system at the steady state? As a proof of concept, to answer this question, we will study a toy model of cellular metabolism exploiting results from the Theory of Optimum Control.

Previously, a similar theoretical approach was applied to this problem, using empirical kinetic models for the reactions [10]. For example, the Monod equations that correlate cell specific growth rate with extracellular substrate concentration by two kinetic parameters [11].

Indeed, the Monod equation is one of the best known processes that describe kinetic reactions in the cell. It has a simple formulation and has been extensively validated [12, 13]. However, several studies have shown that growth kinetic constants are actually a function of culture history and composition of the cell community [14, 15]. On the other, for genomic-scale cell lines, it is almost impossible to know all the kinetic parameters that describe the cell growth rate. In particular, for complex lines, such as mammalian cells, it is difficult to know the real form of the kinetic functions.

To avoid these difficulties, we will substitute the use of kinetic equations by the standard assumptions of Flux Balance Analysis (FBA). FBA allows treatment the cell metabolism in steady state, does not require the use of kinetic parameters, and has been shown to be a good approximation to estimate the cell growth rate [16].

The rest of the work is organized as follows: In the next section, we will present the standard equations that describe the dynamics of the chemostat and a toy model that describe the metabolism of the cell. There, we will show what is the behavior of said system under standard protocols, also referring to the relevant literature where the reader can seek a more in-depth and detailed analysis of the model. We proceed by providing a brief review of the Theory of Optimum Control and in particular of the technique used in our work. Then, we show and discuss the optimal protocol to be used in our model. Finally, we present the conclusions of our work and suggest possible extensions to our approach.

II. THE MODEL

This section is divided into two parts. We first describe the equations that define the behavior of the perfusion system. Essentially, how the number of cells and the concentration of metabolites in the culture change depending on the external parameters of the problem. Next, we present the Toy model mimicking the metabolism of cells. We will remark the connection between these two seemingly disconnected systems of equations.

II.1. The perfusion system

A cell culture produced in continuous mode can be represented schematically as in figure 1. The fundamental dynamic equations that describe this system are [17]:

$$\frac{dX}{dt} = (\mu - \phi D)X \quad X(0) = X_0 \quad (1)$$

$$\frac{ds_i}{dt} = -u_i X - (s_i - c_i)D \quad s_i(0) = s_{i0} \quad (2)$$

where X denotes the cell density in the bioreactor (units: gDW/L), μ the effective cell growth rate (units: 1/h), and the perfusion coefficient, ϕ (unit-less), which characterizes the fraction of cells that escape from the culture through a

cell-retention device.

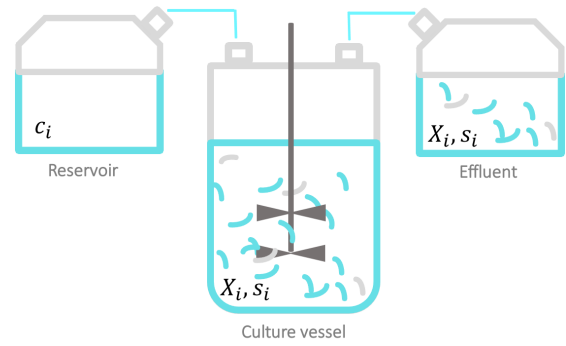


Figure 1. Cells are growing in a bioreactor that is continuously fed fresh medium at a constant flux. While an equivalent flux transports metabolic end products and toxic by-products out of the tank, keeping the culture volume constant. Notation: substrate concentrations in the medium (c_i), cell density and metabolite concentrations in the culture (X, s_i), dilution rate ($D = F/V$, where F is the influx/outflux and V the culture volume).

Equation (1) describes a process in which the number of cells grows at a rate of μ (growth rate), and is removed from the culture at a rate of ϕD . On the other hand, equation (2) describes a process in which metabolite i is removed/injected at a rate $(s_i - c_i)D$ while u_i denotes the specific uptake of metabolite i (units: mM) from the cells. The variable s_i denotes the concentration of metabolite i in the culture (units: mM), while c_i is the concentration of metabolite i in the media formulation. In what follows, i will take on two values that describe glucose consumption and lactate production.

Here two things must be taken into account, first that this set of equations depends on the actual metabolism of the cells through u_i and μ and that the external parameters that control the culture are the dilution rate, D (units: 1/h) and the perfusion coefficient ϕ .

II.2. A Toy Metabolic Network

We study a simple metabolic network first introduced by A. Vazquez et al. [18] to explain the Warburg effect and later exploited by Fernández de Cossio and collaborators [19] to study the effects of toxic by-products of the metabolism, the heterogeneity in a chemostat [20] and the bistability of a Warburg-like phenotype due to microenvironmental cooperation [21]. A diagram of the network is shown in figure 2.

To make the discussion a bit more realistic, we assume that the nutrient consumed is glucose, c_g , and the waste product is lactate, s_l , a well-recognized toxic waste in mammalian cell cultures. The cell can consume c_g from the medium at a rate $u_g > 0$, and secrete lactate at a rate $u_l < 0$. The stoichiometric relationships for this model are summarized in equations (3) and (4) from the conservation of metabolite P and the mass balance constraint of the cell:

$$u_g + u_l - r = 0 \quad (3)$$

$$N_F u_g + N_R r - e - yZ = 0 \quad (4)$$

where N_F and N_R define the contribution of these reactions to the growth rate of biomass of the cell Z . The parameter

e denotes an energetic maintenance demand, modeled as a constant drain of ATP [17,22]. The term y represents the units of metabolite consumed, in this case it is glucose, required per unit of biomass produced [23,24].

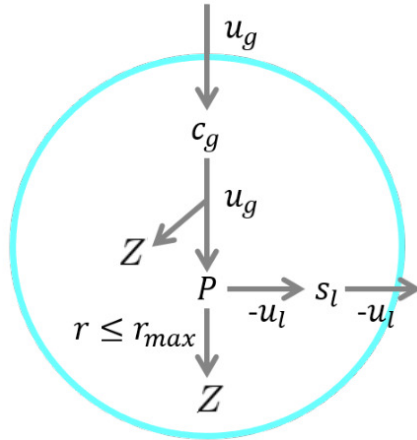


Figura 2. A primary nutrient c_g is consumed by the cell at a rate $u_g \geq 0$. This is processed and the intermediary P is obtained, generating N_F units of energy for each unit of c_g consumed. P can be excreted as a waste product s_l at a rate ($-u_l \leq 0$) (fermentation), or it can be completely oxidized at a rate of $r \geq 0$ (respiration) generating N_R additional energy units ($N_R \gg N_F$). Respiration is valid for $r \leq r_{max}$.

We also introduce the role of the enzymatic costs [17, 19]. Since this cost is higher in the respiration reaction than during fermentation, we limit, for simplicity, only the flux r :

$$r \leq r_m = 0,45 \text{ mmol/gDW/h} \quad (5)$$

Now, since metabolite concentrations in the culture cannot be negative ($s_i \geq 0$), Equation(2) in steady state implies that $u_i \leq c_i D/X$. In our setting:

$$u_g \leq \text{Min}(V, c_g D/X) \quad (6)$$

where V is a constant maximum uptake rate determined by molecular details of the transport process. This bound (Equation (6)) connects the variables in the chemostat with the actual metabolism of the cell.

Moreover, due to the enzymatic cost of respiration shown in the Equations (3) and (5), the flux r takes the form

$$r \leq \text{Min}(u_g, r_m) \quad (7)$$

Therefore, substituting the expressions (6) and (7) in (3), we obtain:

$$u_l = r - u_g = \text{Min}(u_g, r_m) - u_g \quad (8)$$

$$= \text{Min}(\text{Min}(V, c_g D/X), r_m) - \text{Min}(V, c_g D/X) \quad (9)$$

Notice that the study of cell death has been an important area in biomedical research for several years. Many industrially important cell lines have been shown to die by apoptosis (see, for example, the original work of Al-Rubeai et al. [25]). This phenomenon has been observed mainly at the end of the batch culture, and it is due to the deprivation of nutrients such as glucose, glutamine, growth factors and oxygen or due

to the presence of toxic metabolites such as ammonia and lactate [26–28].

Nevertheless, in batch feeding, perfusion, and chemostat cultures, the situation is more complex, as nutrients are constantly being replenished. In these type of cultures, cells can undergo apoptosis in response to various environmental stressors, such as high osmolality, pH fluctuations, oxygen gradients, and deprivation due to insufficient mixing at high cell densities [26, 29–33]. In addition, exposure to increasing hydrodynamic forces from liquid surface bubble burst, gas bubbling, liquid flow or gas entrainment and energy dissipation from the impeller stream can induce apoptosis [31, 34]. Consequently, it is very difficult to obtain a mathematical expression that regulates all these factors involved in continuous or semi-continuous cultures. With more reason in a metabolic model as simple as ours. In particular, in our work we do not take into account bioreactor damage, osmolality, pH fluctuations or oxygen gradients; therefore, we do not take into account cell death due to apoptosis.

However, more generally, we can consider cell death due to the accumulation of toxic by-products, which affects the growth rate. Lactate and ammonia have been shown to inhibit and destroy cells [35–37]. Specifically, the effects of lactate, a metabolite used in our model as s_l , are incorporated in the form of growth inhibition and increased death rate as follows:

$$\mu = Z - \tau s_l \quad (10)$$

where μ is the effective cell growth, Z represents the biomass production and τ is the death rate.

In short, the internal metabolism of the cell is defined by stoichiometric equations (3) and (4), subject to the bounds (6), (7) and (9). The effective growth rate is given by (10).

In practice, we used: $N_F = 2$, $N_R = 38$ as the characteristic ATP yields of glycolysis and respiration respectively [38], $e = 1,0625 \text{ mmol/gDW/h}$ typical of mammalian cells [22], $y = 348 \text{ mmol/gDW}$ is within the range of duplication rates in mammalian cells [36, 39], $V = 0,5 \text{ mmol/gDW/h}$ is the maximum uptake of glucose measured for HeLa cells [40] and the toxicity of waste is $\tau = 0,0022 \text{ h}^{-1}\text{mM}^{-1}$ obtained from linearizing the death rate dependence on lactate in a mammalian cell culture reported by S. Dhir et al. [36].

II.3. Stability of the System

To determine the stability of a system of coupled differential equations, one must analyze the Jacobian eigenvalues of the system. If the real parts are all negative the state is stable, but if at least one eigenvalue has a positive real part, the state is unstable.

Our system of equations (1) and (2) was previously presented by Cossio et al. in the report [17]. In that work, the authors carried out a detailed and very general study of the stability of the system of equations. For the particular set of parameters used in our work, the system is always stable.

II.4. The General Picture

To get a clear picture of what to expect from the model presented above, we summarize some general results here. A relevant question is the following: Given a dilution rate D set by the experimenter, how do cell density and metabolite concentration evolve over time?

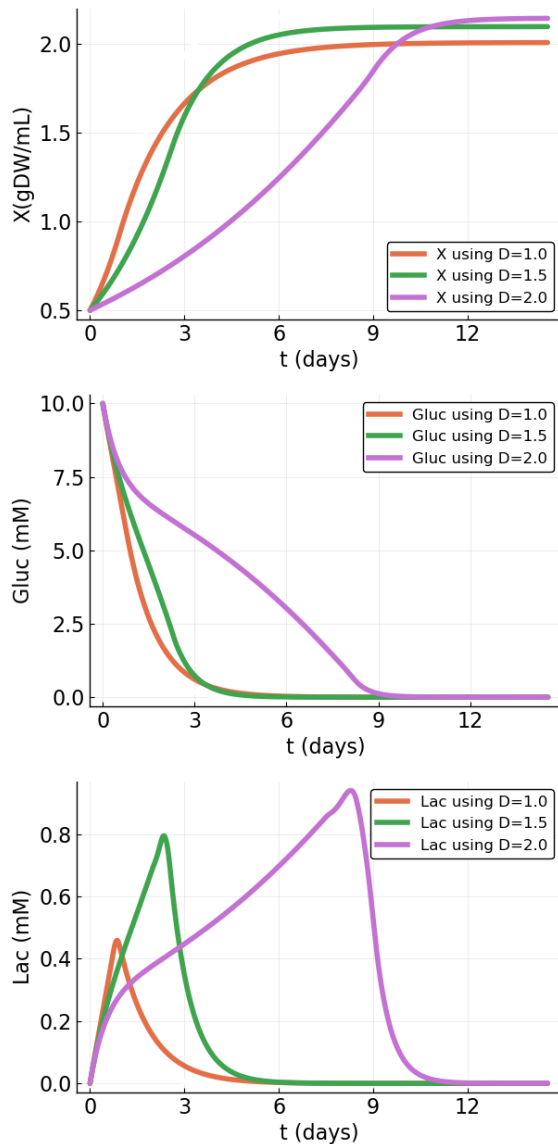


Figura 3. Behavior of cell density and concentrations of nutrients, glucose and lactate, in the culture as a function of time for three different dilution rates ($1,0 \text{ days}^{-1}$, $1,5 \text{ days}^{-1}$ and $2,0 \text{ days}^{-1}$). Initial condition, $X_0 = 0,5 \text{ gDW/mL}$, and $c_{g0} = 10 \text{ mM}$.

The answer to this question can be obtained by means of the numerical solution of the dynamic system (Equations (1)-(2)) with the addition of the FBA hypothesis for the metabolism of the cell, for different values of D . As an example, we show in figure 3, for three different values of D , how the cell density and the concentrations of the glucose and lactate metabolites vary as a function of time.

As can be seen in the figure 3, the dilution rate affects both, the cell density at the steady state and the time required to reach that steady state. Of Course, it also influences the rate at which metabolites are delivered to the culture, and thus changes the

concentrations of metabolites in the vessel, including toxic ones like lactate.

To summarize the previous image, in figure 4 we present, as a function of D , the concentration of cells reached at the steady state. Notice, that X first increases, essentially, because increasing D increases the rate at which nutrients are delivered in the system and this facilitates the growth of the culture. However, if D is too large, ($D > 2 \text{ d}^{-1}$) the removal of the cells from the system occurs so rapidly that the culture is essentially washed out and X is drastically decreased. In this regime, cells just don't growth fast enough.

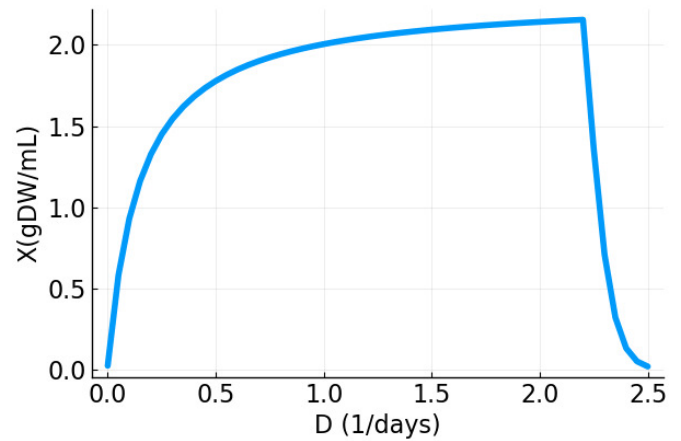


Figura 4. Expected cell density at a stable state for different constant flux of dilution rates.

In the rest of the work, our task is to suggest a suitable protocol for the experimenters in which, controlling and changing D the number of cells at steady state is maximized as quickly as possible. But, before presenting this protocol, we are going to introduce below some concepts and techniques of the Optimal Control Theory.

III. OPTIMAL CONTROL PROBLEM

In Optimal Control Theory [41], you usually solve problems in which you need to maximize a utility function. In this case, it is the cell density X . This maximization occurs through the use of one or more variables from the problem, usually call control parameters. In our case, the control parameter will be the dilution rate D . The difficulty arises because the function to be maximized is constrained to following specific dynamic equations [41], as in our case equations (1) and (2).

Let us, put this in more explicit form. We want to find the optimal control parameter $u(t) = D(t)$ that maximizes $X(t_f)$, where t_f is an unknown final time of the experiment. Similar to the Lagrangian Mechanics formalism [42], this is of course equivalent to minimizing the following objective function:

$$F = -X(t_f) \quad (11)$$

subject to the equations (1) and (2), that for simplicity we rewrite in vectorial form

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}[\mathbf{y}(t), u(t)] \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \quad (12)$$

The above problem is equivalent to minimizing the augmented functional

$$J = \int_0^{t_f} [H - \lambda^T \dot{\mathbf{y}}] dt = \int_0^{t_f} [F + \lambda^T (-\dot{\mathbf{y}} + \mathbf{g})] dt \quad (13)$$

subject to $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$; where $H = F + \lambda^T \mathbf{g}$ is the Hamiltonian, λ the Lagrange multipliers and $H - \lambda^T \dot{\mathbf{y}}$ in the language of Theoretical Mechanics is the Lagrangian L of the problem.

It is easy to show that the necessary conditions for the minimum of F are: [41]

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}, & \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 & \text{State equations} \\ \dot{\lambda} = -\mathbf{H}_{\mathbf{y}}, & \lambda(t_f) = \mathbf{0} & \text{Costate equations} \\ H_u = 0 \\ H(t_f) = 0 \end{cases}$$

III.1. Improvements in u and t_f to reduce J

To implement the improvement strategy numerically [41], we split the time interval $[0, t_f]$ into N subintervals of equal length and use numerical integration (for example, composite Simpson's 1/3 Rule for even number of subintervals) to calculate δJ as well as J . Thus, J is rendered into a function dependent on the vector of optimization parameters

$$p \equiv [u[t_0] \quad u[t_1] \quad \dots \quad u[t_N] \quad t_f]^T \quad (14)$$

where t_0, t_1, \dots, t_N form the time-grid of $(N + 1)$ equispaced grid points in the time interval $[0, t_f]$.

However, there is a complication with this approach. An improvement in t_f changes the time grid, thereby requiring the estimation of controls and states on the new time grid for the next round of improvements. We avoid this situation by linearly transforming the independent variable t in the variable interval $[0, t_f]$ to a new independent variable σ in the fixed interval $[0, 1]$.

Besides, this improvement is ideal in our problem because we don't know the value of the final time t_f . We need to minimize, F , but both t_f and $X(t_f)$ are free. We introduce a new independent variable $\sigma \in [0, 1]$ through the linear relation

$$\sigma = at + b \quad (15)$$

where a and b are some unknown constants.

Thus,

$$\sigma = \frac{t}{t_f} \quad \frac{d\sigma}{dt} = \frac{1}{t_f} \quad \text{and} \quad \frac{dy_i}{dt} = \frac{dy_i}{d\sigma} \frac{d\sigma}{dt} = \frac{dy_i}{d\sigma} \frac{1}{t_f} \quad (16)$$

Substituting, respectively, the initial and final values of σ and t in the above equation, we obtain

$$0 = b \quad \text{and} \quad 1 = at_f + b \quad \Rightarrow \quad a = \frac{1}{t_f} \quad (17)$$

Based on the these relations, the objective of the optimal control problem is to find the control u and the final time t_f that minimize the functional (Eq.(13))

$$J = \int_0^{t_f} L(\mathbf{y}(t), u(t)) \frac{d\sigma}{d\sigma} dt = \int_0^1 t_f L(\mathbf{y}(t), u(t)) d\sigma \quad (18)$$

We compute the integral in the above equation numerically over the fixed σ -interval $[0, 1]$ using composite Simpson's 1/3 Rule (see the Appendix). The interval is split into N subintervals of equal length using $(N + 1)$ equi-spaced grid points.

$$\sigma_0 = 0, \quad \sigma_1, \quad \sigma_2, \quad \dots, \quad \sigma_N = 1 \quad (19)$$

We initialize the control parameter u with N arbitrary values and $t_f = 1, 0$. Then, we integrate state equations ($\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}$) using the initial conditions and the control function values, and save the values of state variables at each grid point. After, we evaluate the objective functional (18) using the values of control functions and state variables and we save the objective functional value. Finally, we integrate costate equations ($\dot{\lambda} = -\mathbf{H}_{\mathbf{y}}$) using the final conditions, the control function values, and the saved values of the state variables. It is also necessary to save the values of costate variables at each grid point.

Now, we improve u and t_f using the gradient of the objective functional as follows:

$$u_i^{k+1} = u_i^k - \epsilon H_{u,i}^k, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (20)$$

$$t_f^{k+1} = t_f^k - \epsilon J_{t_f}^k \quad (21)$$

where $\epsilon \equiv \epsilon_0 / \|\Delta J\|$, and ϵ_0 is some positive real number.

This minimization procedure is known as the Gradient Algorithm. It affords a simple and effective way to solve a wide range of optimal control problems [41].

III.2. Penalty function method

On the top of the previous discussion, we have to consider also that in some cases control parameters must fulfill specific restrictions. For example, in our case that:

$$D \geq D_0 \quad (22)$$

A constraint that can be generally expressed as

$$f(\mathbf{y}, u) = -D + D_0 \leq 0$$

To solve this additional restriction problem, we use the *Penalty Function Method* [41]: This is a simple method for solving an optimal control problem with inequality constraints. As the name suggests, the method penalizes the objective functional in proportion to the violation of the constraints, which are not enforced directly. A constrained problem is then solved

using successive applications of an optimization method with increasing penalties for these constraint violations. This strategy gradually leads to the solution, which satisfies the inequality constraints.

The problem is equivalent to minimizing the augmented functional

$$J = \int_0^{t_f} [F + \lambda^T(-\dot{\mathbf{y}} + \mathbf{g}) + \mu_\lambda^T f] dt = \int_0^{t_f} (L - \lambda^T \dot{\mathbf{y}}) dt \quad (23)$$

where, in general, μ_λ are time dependent multipliers associated with the algebraic constraints f and the Lagrangian is

$$L = F + \lambda^T \mathbf{g} + \mu_\lambda^T f = H + \mu_\lambda^T f$$

The necessary conditions for the minimum of J are

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{y}} = \mathbf{g} \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \quad \dot{\lambda} = -L_{\mathbf{y}} \quad \lambda(t_f) = 0 \\ f \leq 0 \quad L_u = \mathbf{0} \quad L(t_f) = 0 \quad \mu_\lambda \geq \mathbf{0} \quad \mu_\lambda^T L_{\mu_\lambda} = \mathbf{0} \end{aligned}$$

To handle the inequalities, the penalty function method is slightly modified as follows. At any time, the multipliers corresponding to the inequalities are prescribed as

$$\mu_\lambda = \mathbf{W}h \quad (24)$$

where \mathbf{W} is an $l \times l$ diagonal weighting matrix with all positive diagonal elements and h is

$$h = \begin{cases} 0 & \text{if } f(t) \leq 0 \\ 1 & \text{if } f(t) > 0 \end{cases}$$

Thus, the augmented objective functional

$$J = \int_0^{t_f} [F + \lambda^T(-\dot{\mathbf{y}} + \mathbf{g}) + h\mathbf{W}f] dt$$

has the penalty function $h\mathbf{W}f$, which is positive and enlarges J whenever any inequality is violated. The computational algorithm to find the minimum is in the Appendix.

IV. RESULTS AND DISCUSSION

IV.0.1. Solution of Optimal Control Problem

First, we describe how the above formalism translates into our specific problem. As we already mentioned, the equivalent problem in the fixed σ -interval $[0, 1]$ is to minimize

$$F = -X(t_f) \quad (25)$$

The necessary conditions for the minimum in our problem are

$$1. \dot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}, y(0) = y_0$$

The state equations are

$$\begin{aligned} \frac{dX}{d\sigma} &= t_f(\mu - \phi D)X; & X(0) &= X_0 \\ \frac{ds_g}{d\sigma} &= t_f(-u_g X - (s_g - c_g)D); & s_g(0) &= s_{g0} \\ \frac{ds_l}{d\sigma} &= t_f(-u_l X - s_l D); & s_l(0) &= 0 \end{aligned}$$

The Hamiltonian is then given by

$$H = t_f[-X + \lambda_x(\mu - \phi D)X + \dots + \lambda_g(-u_g X - (s_g - c_g)D) + \lambda_l(-u_l X - s_l D)]$$

The Lagrangian is

$$L(\sigma) = H + [f(y_i, u_i)]^T \mathbf{W}f(y_i, u_i); \quad i = 0, 1, \dots, N$$

where

$$f(\mathbf{y}, u) = -D + D_0 \leq 0$$

and $\mathbf{W} = \alpha^r \mathbf{1}$. Then

$$\begin{aligned} L(\sigma) &= t_f[-X + \lambda_x(\mu - \phi D)X + \dots \\ &\quad + \lambda_g(-u_g X - (s_g - c_g)D) + \dots \\ &\quad + \lambda_l(-u_l X - s_l D)] + \alpha^r (-D + D_0)^2 \end{aligned}$$

$$2. \frac{d\lambda}{d\sigma} = -L_{\mathbf{y}}, \lambda(1) = 0$$

$$3. L_u = 0$$

In the Appendix, there is a detailed description of these expressions and their numerical implementations.

The results of our numerical simulations are presented in figure 5, where we compare the output of our optimization with the ones obtained using fixed dilution rates (see also figure 3).

We can see that using an appropriate dilution rate protocol it is possible to achieve a higher cell density than that obtained using a constant dilution rate value, and also to reach this value more quickly. Note that through this protocol also the concentration of lactate, a toxic by-product of metabolism, is significantly reduced in the culture. We want to point out that predicting the optimal protocol to follow based on experience is not trivial and requires a high expenditure of time and resources.

As can be seen in figure 5, the graph indicating the optimal dilution protocol is very noisy. This noise is an effect of finite size due to the finite number N of partitions used to describe the interval $\sigma = [0, 1]$. This can be solved by increasing N , but

the computational cost would be higher.

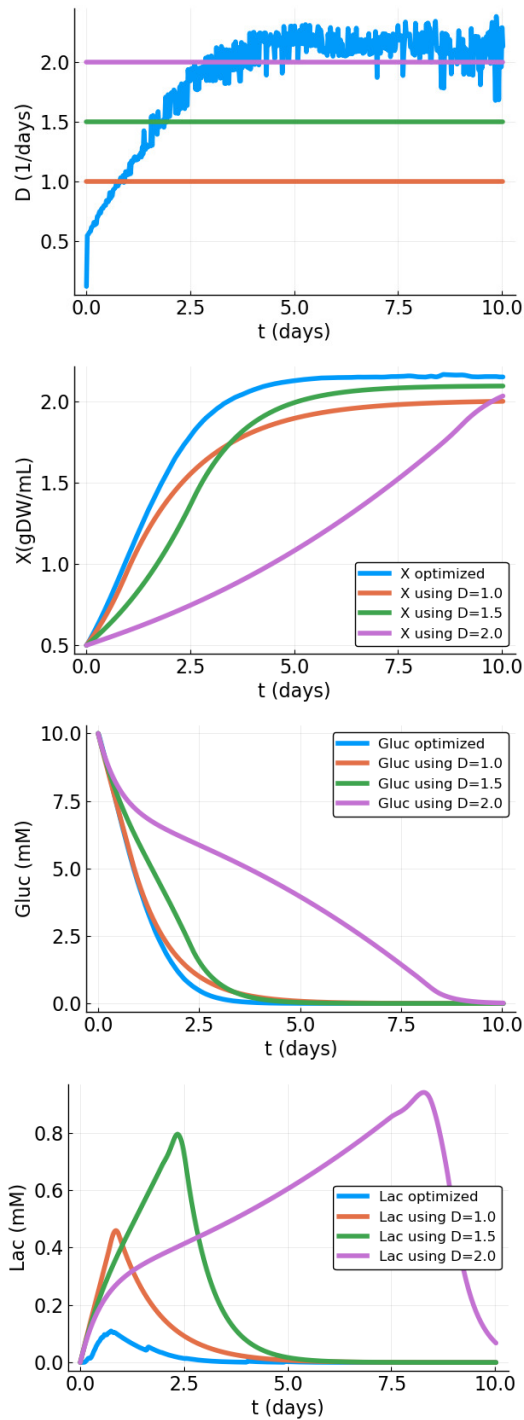


Figure 5. Dilution rate, cell density, and concentrations of glucose and lactate in the culture in time. The blue line shows the results of the Optimal Control Problem, and the others lines are shown above in figure 4. In all graphs, we use as initial conditions $X_0 = 0,5$ gDW/mL, $c_{g0} = 10$ mM; and $\phi = 0,5$. In the optimization, we use the follow parameters: $N = 500$, $\epsilon = 0,1$, and 30×10^6 iterations.

Therefore, to provide experimenters with a $D(t)$ curve without this noise, we performed a simple interpolation to describe the protocol for D . We use a linear fit for the first part of the protocol, and a constant for the second. In practice, $D(t) = 0,60 \text{ days}^{-1} + 0,02 \text{ days}^{-2}t$ during the first 3 days of the process and $D = 2,15 \text{ days}^{-1}$ for the rest of the time (red dashed line in figure 6). To test the efficiency of the protocol, we compared

the results of using our interpolated function with two similar protocols for the dilution rate D . The results are summarized in figure 6. We show that if the dilution increases too slowly, the steady state will be reached later in time. On the contrary, if it is increased too quickly, it will take much longer to reach the steady state, but in the process it will produce much more toxic by-products.

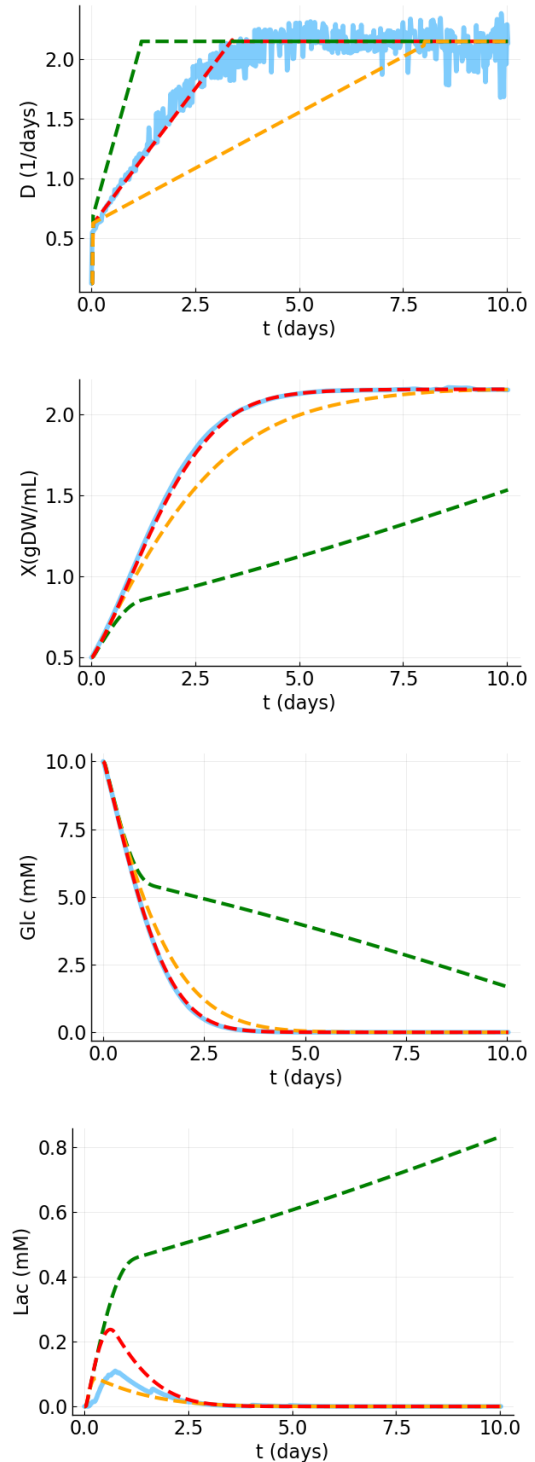


Figure 6. Comparison of cell density and glucose and lactate concentrations using two dilution rates somewhat different from the optimal obtained (blue line).

V. CONCLUSIONS

In this work, we have modeled a continuous cell culture using a set of non-linear equations. Our model describes the dynamics of the cell density as a combination of intracellular properties (cell growth) and external parameters (perfusion coefficient and dilution) in the chemostat. It also describes the dynamics of metabolite concentrations in the culture as a balance between cell consumption/secretion and the dilution rate.

As a proof of concept, we study a simple metabolic network and formulated the cell growth rate through the FBA algorithm. In this way, we avoid the need to use kinetic parameters to describe metabolic reactions. These parameters are usually unknown, or variable over time.

For the studied model, exploiting Optimal Control Theory techniques, including the dynamic penalty method, we were able to predict an optimal protocol for the dilution rate as a function of time. The use of this protocol maximizes the cell density at the steady state, minimizes the time in which this steady state is reached, and also minimizes the secretion of lactate in the culture.

Although these results can no longer be translated already into experimental systems, they support the feasibility of the approach for more complex and realistic problems. We are sure that the extension of this technique to the study of Genome Scale Metabolic Networks could be of great relevance in the biotechnological industry. Work is being done in this direction.

ACKNOWLEDGMENTS

This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation program MSCA-RISE-2016 under Grant Agreement No. 734439 IN-FERNET. This research has also been funded by the Office for the management of funds and projects of the Ministry of Science, Technology and Environment of the Republic of Cuba within the project PN223LH010-015.

VI. APPENDICES

VI.1. Computational Algorithm

The objective in this problem is to find the control u that minimizes

$$\int_0^{t_f} F[\mathbf{y}(t), u(t)] dt$$

subject

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}[\mathbf{y}(t), u(t)], \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$$

and l algebraic equality constraints

$$f(\mathbf{y}, u) = 0$$

The equivalent problem is to find the minimum of the augmented functional

$$J = \int_0^{t_f} [F + \lambda^T(-\dot{\mathbf{y}} + \mathbf{g}) + \mu_\lambda^T f] dt = \int_0^{t_f} (L - \lambda^T \dot{\mathbf{y}}) dt \quad (26)$$

where, in general, μ_λ are time dependent multipliers associated with the algebraic constraints f .

The necessary conditions for the minimum of J are

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{y}} &= \mathbf{g} & \mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0 & \dot{\lambda} &= -L_{\mathbf{y}} & \lambda(t_f) &= 0 \\ f &\leq 0 & L_u &= \mathbf{0} & L(t_f) &= 0 \end{aligned}$$

At any time, the multipliers corresponding to the inequalities are prescribed as

$$\mu_\lambda = \mathbf{W}h \quad (27)$$

where \mathbf{W} is an $l \times l$ diagonal weighting matrix with all positive diagonal elements and h is

$$h = \begin{cases} 0 & \text{if } f(t) \leq 0 \\ 1 & \text{if } f(t) > 0 \end{cases}$$

To determine u and t_f at the minimum [41],

1. Initialize the outer counter $r = 0$. Choose a real number $\alpha > 1$.
2. Set the $l \times l$ diagonal weighting matrix $\mathbf{W} = \alpha^r \mathbf{1}$, where $\mathbf{1}$ is the $l \times l$ identity matrix.
3. Set the iteration counter $k = 0$. Assume $t_k = 1, 0$ and obtain the fixed σ -grid of $(N+1)$ equi-spaced grid points

$$\sigma_0 = 0, \quad \sigma_1, \quad \sigma_2, \quad \dots, \quad \sigma_N = 1 \quad (28)$$

At each grid point, assume control function values as follows:

$$u_i^k \equiv u^k(\sigma_i); \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (29)$$

4. Integrate state equations forward from $\sigma = 0$ to 1 using the initial conditions and the control function values u_i^k , $i = 0, 1, \dots, N$. Save the values of state variables at the grid points.
5. Evaluate the objective functional using the controls u_i^k and the state variables \mathbf{y}_i^k . Using composite Simpson's 1/3 Rule, the objective functional value is given by

$$J = \frac{1}{3N} \left(A_0 + 4 \sum_{1,3,5,\dots}^N A_i + 2 \sum_{2,4,6,\dots}^N A_i + A_N \right) \quad (30)$$

where $A_i \equiv t_f F(\mathbf{y}_i, u_i) + [f(\mathbf{y}_i, u_i)]^T \mathbf{W} f(\mathbf{y}_i, u_i)$; $i = 0, 1, \dots, N$.

6. Check the improvement in F for $k > 0$. Given a tolerable error $\epsilon_1 > 0$, if

$$|F^k - F^{k-1}| < \epsilon_1 \quad (31)$$

7. Integrate costate equations backward from $\sigma = 1$ to 0 using the final conditions, the controls u_i^k , and the state variables y_i^k . Save the values of costate variables at the grid points.

8. Evaluate the gradient of J^k by calculating the partial derivatives

$$H_{u,i}^k \equiv H_{u_i}^k(\sigma_i) = H_{u_i}(y_i^k, u_i^k, \lambda_i^k); \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (32)$$

where

$$H_i^k \equiv t_f^k [F(y_i^k, u_i^k, \lambda_i^k) + \lambda_i^T g(y_i^k, u_i^k, \lambda_i^k)]; \quad i = 0, 1, 2, \dots, N \quad (33)$$

and

$$J_{t_f}^k = \int_0^1 \frac{H^k}{t_f^k} d\sigma = \frac{1}{3N t_f^k} \left(H_0^k + 4 \sum_{1,3,5,\dots} H_i^k + 2 \sum_{2,4,6,\dots} H_i^k + H_N^k \right) \quad (34)$$

Check the magnitude of the gradient. Given a small positive real number ϵ_2 , if the norm of the gradient

$$\sqrt{\sum_{i=0}^N [H_{u_i}(y_i^k, u_i^k, \lambda_i^k)]^2 + [J_{t_f}^k]^2} < \epsilon_2 \quad (35)$$

then take these results.

9. Improve control functions and the final time by calculating

$$u_i^{k+1} = u_i^k - \epsilon H_{u,i}^k, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (36)$$

$$t_f^{k+1} = t_f^k - \epsilon J_{t_f}^k \quad (37)$$

where $\epsilon \equiv \epsilon_0 / \|\Delta J\|$, ϵ_0 is some positive real number and

$$\nabla J \equiv [L_u(\sigma_0) \quad L_u(\sigma_1) \quad \dots \quad L_u(\sigma_N) \quad J_{t_f}]^T \quad (38)$$

where

$$L(\sigma_i) = t_f [F(y_i, u_i) + \lambda_i^T g(y_i, u_i)] + [f(y_i, u_i)]^T \mathbf{W} f(y_i, u_i); \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (39)$$

10. When the gradient algorithm converges in, say, k iterations, save the state, the control, and the final time,

$$y_i^k, \quad u_i^k; \quad i = 0, 1, \dots, N; \quad \text{and} \quad t_f^k$$

11. Increment the counter r by one and assign

$$y_i^k \rightarrow y_i^r, \quad u_i^k \rightarrow u_i^r; \quad \mathbf{h}_i^k \rightarrow \mathbf{h}_i^r; \quad i = 0, 1, \dots, N; \quad \text{and} \quad t_f^k \rightarrow t_f^r$$

12. Given a positive real number ϵ_3 close to zero, if the error

$$E = \sum_{i=0}^N [\mathbf{h}_i^r]^T f(y_i^r, u_i^r) > \epsilon_3 \quad (40)$$

then some constraints are violated. Therefore, repeat the algorithm.

Otherwise, the constraints $f \leq 0$ are satisfied, and the values

$$y_i^r, \quad u_i^r; \quad i = 0, 1, \dots, N; \quad \text{and} \quad t_f^r$$

correspond to the minimum.

VI.2. Solution of Optimal Control Problem

VI.2.1. Toy model

Dynamic Problem

The Lagrangian is given by

$$L(\sigma) = t_f [-X + \lambda_x(\mu - \phi D)X + \lambda_g(-u_g X - (s_g - c_g)D) + \lambda_l(-u_l X - s_l D)] + \alpha^r [(-D + D_0)^2 + \phi^2 + (\phi - 1)^2] \quad (41)$$

The following conditions are necessary:

$$\blacksquare \frac{d\lambda}{d\sigma} = -L_y, \quad \lambda(1) = 0$$

The costate equations are

$$\frac{d\lambda_x}{d\sigma} = -L_{\lambda_x} = t_f [1 - \lambda_x(\mu - \phi D) + \frac{\partial \mu}{\partial X} X] +$$

$$\lambda_g(u_g + \frac{\partial u_g}{\partial X} X) + \lambda_l(u_l + \frac{\partial u_l}{\partial X} X), \quad \lambda_x(1) = 0$$

$$\frac{d\lambda_g}{d\sigma} = -L_{\lambda_g} = t_f \lambda_g D, \quad \lambda_g(1) = 0$$

$$\frac{d\lambda_l}{d\sigma} = -L_{\lambda_l} = t_f (-\lambda_x X \frac{\partial \mu}{\partial s_l} + \lambda_l D), \quad \lambda_l(1) = 0$$

where

$$\frac{\partial \mu}{\partial X} = \begin{cases} -\frac{1}{y} \frac{c_g D}{X^2} (N_F + N_R) & \text{if } c_g D/X < r_m \\ -\frac{1}{y} \frac{c_g D}{X^2} N_F & \text{if } r_m \leq c_g D/X \leq V \\ 0 & \text{if } V < c_g D/X \end{cases}$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial s_l} = -\tau$$

and

$$\frac{\partial u_g}{\partial X} = \begin{cases} -\frac{c_g D}{X^2} & \text{if } V \geq c_g D/X \\ 0 & \text{if } V < c_g D/X \end{cases}$$

$$\frac{\partial u_l}{\partial X} = \begin{cases} 0 & \text{if } c_g D/X < r_m \\ \frac{c_g D}{X^2} & \text{if } r_m \leq c_g D/X \leq V \\ 0 & \text{if } V < c_g D/X \end{cases}$$

■ $L_u = 0$

$$\frac{\partial L}{\partial D} = t_f \left\{ X \left[\lambda_x \left(\frac{\partial \mu}{\partial D} - \phi \right) - \lambda_g \frac{\partial u_g}{\partial D} - \lambda_l \frac{\partial u_l}{\partial D} \right] - t_f [\lambda_g (s_g - c_g) - \lambda_l s_g - 2\alpha^r (-D + D_0)] \right\} = 0 \quad (42)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \phi} = t_f [-DX\lambda_x] + \alpha^r (4\phi - 2) = 0 \quad (43)$$

where

$$\frac{\partial \mu}{\partial D} = \begin{cases} \frac{1}{y} \frac{c_g}{X} (N_F + N_R) & \text{if } c_g D/X < r_m \\ \frac{1}{y} \frac{c_g}{X} N_F & \text{if } r_m \leq c_g D/X \leq V \\ 0 & \text{if } V < c_g D/X \end{cases}$$

and

$$\frac{\partial u_g}{\partial D} = \begin{cases} \frac{c_g}{X} & \text{if } V \geq c_g D/X \\ 0 & \text{if } V < c_g D/X \end{cases}$$

$$\frac{\partial u_l}{\partial D} = \begin{cases} 0 & \text{if } c_g D/X < r_m \\ -c_g/X & \text{if } r_m \leq c_g D/X \leq V \\ 0 & \text{if } V < c_g D/X \end{cases}$$

REFERENCES

- [1] T. S. Le, M. McCann, S. M. Azarin and W.-S. Hu, *Chem. Eng. Prog.* **112**, 34 (2016).
- [2] M. S. Croughan, K. B. Konstantinov and C. Cooney, *Biotechnol. Bioeng.* **112**, 648 (2015).
- [3] A. Kumar, I. A. Udugama, C. L. Gargalo and K. V. Gernaey, *Processes* **8**, 1641 (2020).
- [4] A. P. B. Benyahia, L. Pereira and F. V. Santos da Silva, *New and Future Developments in Microbial Biotechnology and Bioengineering*, **69**, 89 (2020).
- [5] M. Guevara-Martinez, *Strain-and bioprocess-design strategies to increase production of (r)-3-hydroxybutyrate by escherichia coli*, Ph.D. thesis, KTH Royal Institute of Technology (2019).
- [6] B. A. Pérez-Fernández, J. Fernandez-de Cossio-Diaz, T. Boggiano, K. León and R. Mulet, *Biotechnol. Bioeng.* **118**, 1884 (2021).
- [7] P. Biechele, C. Busse, D. Solle, T. Scheper and K. Reardon, *Eng. Life Sci.* **15**, 469 (2015).

- [8] D. Martens, C. De Gooijer, C. Van der Velden-De Groot, E. Beuvery and J. Tramper, *Biotechnol Bioeng* **41**, 429 (1993).
- [9] M. K. F. Wolf, A. Closet, M. Bzowska, J.-M. Bielser, J. Souquet, H. Broly and M. Morbidelli, *Biotechnol. J.* **14**, 1700722 (2019).
- [10] G. Alwan, *Int. J. Chem. Process Eng. Res.* **5** (2012).
- [11] J. Monod, *Annu. Rev. Microbiol.* **3**, 371 (1949).
- [12] J. Alvarez-Ramirez, M. Meraz and E. J. Vernon-Carter, *Biochem. Eng. J.* **150**, 107305 (2019).
- [13] B. Chezeau and C. Vial, *Biohydrogen, Biomass, Biofuels, Biochemicals* **445**, 483 (Elsevier, 2019), 2nd edition.
- [14] D. Orhon, E. U. Cokgor, G. Insel, O. Karahan and T. Katipoglu, *Bioresour. Technol.* **100**, 5678 (2009).
- [15] I. Pala-Ozkok, A. Rehman, N. Yagci, E. Ubay-Cokgor, D. Jonas and D. Orhon, *Bioresour. Technol.* **126**, 274 (2012).
- [16] R. U. Ibarra, J. S. Edwards and B. O. Palsson, *Nature* **420**, 186 (2002).
- [17] J. Fernandez-de-Cossío-Díaz, K. Leon and R. Mulet, *PLoS Comput. Biol.* **13**, e1005835 (2017).
- [18] A. Vazquez, J. Liu, Y. Zhou and Z. N. Oltvai, *BMC. Syst. Biol.* **4**, 58 (2010).
- [19] J. Fernandez-de-Cossío-Díaz and A. Vazquez, *Sci. Rep.* **7**, 13488 (2017).
- [20] J. Fernandez-de-Cossío-Díaz and R. Mulet **15**, e1006823 (2019).
- [21] J. Fernandez-de-Cossío-Díaz, A. D. Martino, R. Mulet, *Sci. Rep.* **7**, 3103 (2017).
- [22] D. Kilburn, M. Lilly and F. Webb, *J. Cell. Sci.* **4**, 645 (1969).
- [23] A. M. Feist and B. O. Palsson, *Curr. Opin. Microbiol.* **13**, 344 (2010).
- [24] A. M. Feist and B. O. Palsson, *Genome Biol.* **17**, 110 (2016).
- [25] M. Al-Rubeai, D. Mills and A. Emery, *Cytotechnology* **4**, 13 (1990).
- [26] N. Simpson, R. Singh, A. Perani, C. Goldenzon and M. Al-Rubeai, *Biotechnol. Bioeng.* **59**, 90 (1998).
- [27] R. Singh, M. Al-Rubeai, C. Gregory and A. Emery, *Biotechnol. Bioeng.* **44**, 720 (1994).
- [28] S. Mercille and B. Massie, *Biotechnol. Bioeng.* **44**, 1140 (1994).
- [29] B. Krampe and M. Al-Rubeai, *Cytotechnology* **62**, 175 (2010).
- [30] A. Perani, R. Singh, R. Chauhan and M. Al-Rubeai, *Cell. Culture Engineering VI 177*, **188** (Springer, 1998).
- [31] M. Al-Rubeai, R. Singh, M. Goldman and A. Emery, *Biotechnol. Bioeng.* **45**, 463 (1995).
- [32] R. Singh and M. Al-Rubeai, *Apoptosis* **167**, 184 (1998).
- [33] J. S. Ryu and G. M. Lee, *Biotechnol. Bioeng.* **62**, 120 (1999).
- [34] Y. Chisti, *Trends Biotechnol.* **18**, 420 (2000).
- [35] B. C. Batt and D. S. Kompala, *Biotechnol. Bioeng.* **34**, 515 (1989).
- [36] S. Dhir, K. J. Morrow, R. R. Rhinehart and T. Wiesner, *Biotechnol. Bioeng.* **67**, 197 (2000).
- [37] B. S. Cummings and R. G. Schnellmann, *Curr. Protoc. Pharmacol.* **25**, 12 (2004).
- [38] B. Alberts and A. Johnson, *Molecular Biology of the Cell* (Garland Science, Taylor and Francis Group, New York, NY, 2015), 6th edition.

- [39] M. A. Bree, P. Dhurjati, R. F. Geoghegan and B. Robnett, *Biotechnol. Bioeng.* **32**, 1067 (1988).
- [40] S. Rodríguez-Enríquez, A. Marín-Hernández, J. C. Gallardo-Pérez and R. Moreno-Sánchez, *J. Cell. Physiol.* **221**, 552 (2009).
- [41] S. R. Upreti, *Optimal control for chemical engineers* (Taylor & Francis, 2013).
- [42] H. Goldstein, C. Poole and J. Safko, *Classical mechanics* (American Association of Physics Teachers, New York, South Carolina, 2002), 3rd edition.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



HURRICANE MAXIMUM POTENTIAL INTENSITY AND GLOBAL WARMING

LA INTENSIDAD POTENCIAL MÁXIMA DE LOS HURACANES Y EL CALENTAMIENTO GLOBAL

A. PÉREZ-ALARCÓN^{a†}, J.C. FERNÁNDEZ-ALVAREZ^a, O. DÍAZ-RODRÍGUEZ^b

a) Departamento de Meteorología, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Universidad de La Habana, Cuba; albenisp@instec.cu[†]

b) Centro de Ciencias de la Atmósfera, Universidad Autónoma de México. México

† corresponding author

Recibido 18/2/2021; Aceptado 10/10/2021

A study of the impact of global warming on the intensity of tropical cyclones (TCs) in the North Atlantic (NATL) basin for 2050, 2075 and 2100 was developed, based on the maximum potential intensity (MPI). For this study, the Geophysical Fluid Dynamics Laboratory – Climate Model (GFDL-CM4) sea surface temperature (SST) outputs and the Hurricane Maximum Potential Intensity (HuMPI) model were used. In the analysis of the mean SST on TCs season, it was observed an increase of 3° C relative to the mean SST of 2017. For 2050, 2075 and 2100 the peak of maximum potential intensity of TCs occurs in June, displaced relative to 2017 where it is observed in July and August. In addition, a continuous increase in the MPI was verified, reaching its extreme values at the end of this century. Thus, for 2100 the maximum potential wind speed exceeds 325 km/h while the potential minimum central pressure is less than 870 hPa. In the Gulf of Mexico, the Caribbean Sea and the Bahamas archipelago area are observed the highest values of potential intensity throughout the TCs season. Monthly, it was observed a similar behavior in all years and lower values are observed in October and November. Likewise, the theoretical intensification rates in 24 hours observed is higher than 380 km/h in 2100, while the mean MPI will be 30 % higher at the end of this Century than today. Given the economic and social impact of the TCs, it is necessary to continue studying the impact of climatic change on the intensity and frequency of TCs.

Se desarrolló un estudio del impacto del calentamiento global en la intensidad de los ciclones tropicales (CTs) en la cuenca del océano Atlántico Norte (NATL) para el 2050, 2075 y 2100, basado en su intensidad máxima potencial (IMP). Para este estudio, se utilizaron las salidas de la temperatura superficial del mar (TSM) del modelo climático Geophysical Fluid Dynamics Laboratory (GFDL-CM4), así como el modelo Hurricane Maximum Potential Intensity (HuMPI). En el análisis de la TSM media durante la temporada ciclónica en NATL, se observó un incremento de 3° C con respecto a la TSM media de 2017. Para 2050, 2075 y 2100 el pico de intensidad máxima potencial de los CTs ocurre en junio, desplazado respecto a 2017 donde se observa en julio y agosto. Además, se verificó un aumento continuo de la IMP, alcanzando sus valores extremos a fines de este siglo. Así, para 2100 la velocidad máxima del viento potencial excede los 325 km/h mientras que la presión central mínima potencial es menor de 870 hPa. En el Golfo de México, el Mar Caribe y la zona del archipiélago de las Bahamas se observan los valores más altos de intensidad potencial durante toda la temporada de CTs. Mensualmente se observó un comportamiento similar en todos los años y se observaron valores más bajos en octubre y noviembre. De igual forma, las tasas teóricas de intensificación en 24 horas observadas superan los 380 km/h en 2100, mientras que el IMP media será un 30 % superior a finales de este siglo que en la actualidad. Dado el impacto económico y social de los CTs, es necesario continuar estudiando el impacto del cambio climático en la intensidad y frecuencia de estos sistemas.

PACS: Global warming, (calentamiento global), 92.30.Np, 92.70.Mn; weather analysis and prediction (análisis y predicción del clima), 92.60.W; climate change and variability (cambio y variabilidad del clima), 92.70.Np

I. INTRODUCTION

Tropical cyclones (TCs) are one of the atmospheric events that more frequently cause natural disasters. In recent years, an increase of economic losses has been observed, which is influenced by the increase of the population in coastal areas and the increase of the economic value of infrastructures [1]. As a result, any future changes in TC activity will have significant economic and social impact, with highest impact in coastal areas.

The development of new techniques aiming at improving the TC intensity and trajectory forecasting is an imperative for the international scientific community. While a continuous decrease in errors has been observed in TCs track forecast, and despite the use of sophisticated atmospheric models, there are modest advances in predicting the intensity of these

systems [2, 3]. This is directly related to the uncertainties in the knowledge of the physical and dynamic mechanisms that govern the intensification and weakening of TCs. Intensity change of TCs is a complex and interactive nonlinear process that often involves several factors such as the influence of the underlying surface (e.g. the ocean) [4–6]; the internal dynamics of TCs (e.g., the inner-core structure and eyewall replacement [7–9]; and the effect of the large-scale environment (e.g., vertical wind shear and humidity) [10].

The impact of ocean conditions on the formation and maintenance of TCs is known. For example, the Sea Surface Temperature (SST) affects the latent heat, sensible heat and water vapor fluxes transported from the ocean into TCs [11, 12]. It is widely accepted that the ocean provides the energy necessary to establish and maintain secondary circulation, however, there is still no precise knowledge of how the

thermal variations of the upper layers of the ocean affect the intensity changes of TCs [6, 13–15].

It has been widely accepted that TCs can be considered as a Carnot heat engine, which extracts energy from the ocean surface in the form of entropy flow, a process determined primarily by the SST [16–18], which plays an important role in the formation and intensification of these systems [19]. This is the well-known theory of Maximum Potential Intensity (MPI) developed by [18], which establishes the sea surface as a source of potential energy and, this potential energy is converted by the TC in the kinetic energy necessary to balance the friction dissipation in the mature state of the hurricane.

The SST in the regions of TC formation has increased several tenths of a degree in recent decades due to climate change [1], which combined with normal multidecadal oscillations establish ideal conditions for the formation and development of hurricanes. Furthermore, researchers from around the world have directed their efforts to understand the effect that climate change has on the TCs genesis and intensification [20]. Numerous studies have shown that TCs will be more intense and will cause more damage in the coming decades [21–23]. Emanuel [24] used an analytic model to determine an approximate expression (equation 1) for the intensification rate of a TC under favorable conditions to develop.

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \frac{C_k}{2h}(V_{mpi}^2 - V_{max}^2) \quad (1)$$

Here V_{max} is the maximum wind speed of the TC, V_{mpi} is the TC maximum potential intensity, C_k is the nondimensional surface exchange coefficient for enthalpy and h is the boundary layer depth. It was used $h = 2$ km and $C_k = 10^{-3}$ following [25].

There is currently a strong consensus that SST will increase as a consequence of climate change. Emanuel [25], using expression 1, showed that it will be observed a rising in the intensity rates of the TC in 24 hours with the increasing of the SST, because the intensity rates depend of the square of the MPI which is expected to increase with the SST. This behavior will make more difficult the intensity forecast of the TCs in the future.

This contribution aims to determine the maximum potential intensity that TCs could reach in years 2050, 2075 and 2100. For this, the SST outputs of the GFDL-CM4 climate model (Geophysical Fluid Dynamics Laboratory - Climatic Model version 4.0) [26] and the HuMPI (Hurricane Maximum Potential Intensity) model [27, 28] will be used.

II. MATERIALS AND METHODS

II.1. GFDL-CM4

GFDL-CM4.0 is the latest version of global climate models developed by the Geophysical Fluid Dynamics Laboratory (GFDL), with the aim of making future projections of Earth climate and also to participate in the Climate Models Intercomparison Project Phase 6 (CMIP6) [29]. The objective

of CMIP is to better understand past, present and future climate changes that arise from natural forced variability or in response to changes in radiative forcing in a multimodel context. Their results form the basis of a series of reports produced by the Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC).

GFDL-CM4.0 includes the following components: aerosol, where the GFDL-AM4 (GFDL Global Atmosphere) with a nominal horizontal resolution of 1 degree and 33 vertical levels with the top at 1 hPa was used, while for land it was used the GFDL-LM4 (GFDL Land Model) with a nominal horizontal resolution of 1 degree, 20 levels and the level below 10m. It includes dynamic vegetation and land use. On the other hand, water and ice on the ground, multilayer snow, rivers and lakes were taken into account. For the ocean, the GFDL-OM4p25 (GFDL Global Ocean and Sea Ice Model) with 0.25 degrees of resolution and 75 levels was used. For further information consult [30] and [26]. It was update for RCP8.5 (Representative Concentration Pathway). For further information about RCP8.5 see [31]. Precisely, in this study the extreme scenario RCP8.5 was used.

II.2. HuMPI

The HuMPI model was developed in the Department of Meteorology of the Higher Institute of Technologies and Applied Sciences (InSTEC), Havana University. It is composed of a modified version of MPI-theory [18] and the theory of boundary layer of the tropical cyclones described by Smith [32]. It considers the TCs as a generalized Carnot heat engine. The model works under the assumption that the TC is in a stationary state and that its intensification and persistence depend entirely on the thermal instability that exists between the ocean and the tropopause. So, the TC is powered by the latent heat transferred by evaporation from the ocean to the atmosphere through surface winds.

The model initialization requires the SST and the minimum central pressure when the system reaches the category of tropical storm. Authors in references [27, 28, 33] provide a complete description of the physical aspects and the fundamental characteristics of this model. In the simulations carried out in this research, a minimum central pressure of 1005 hPa was assumed.

II.3. Data and Methodology

The study was made for the North Atlantic basin (NATL) between 0 to 42 degrees of latitude and 250 to 358 degrees of longitude, as shown in figure 1, because the TCs are formed and develop large part of their trajectory in this area. The SST of TC season in NATL was taken from the outputs of the GFDL-CM4 for years 2050, 2075 and 2100 [30] with 0,25° (about 25 km) of resolution, available at <https://esgf-data.dkrz.de/search/cmip6-dkrz>.

In addition, the MPI for Hurricane Irma (2017), Hurricane Dorian (2019) and Hurricane Lorenzo (2019) was calculated

using HuMPI model initialized with the SST outputs of the GFDL-CM4 and the high-resolution SST analysis products from infrared satellite data of the Advanced Very High Resolution Radiometer (AVHRR), available at <https://www.ncei.noaa.gov/thredds/blended-global/oisst-catalog.html>. The HuMPI outputs for these hurricanes will be taken as baseline.

The HuMPI model, using the SST derived from satellite products, calculated a maximum potential intensity of 310 km/h for maximum wind speed (figure 3a) and 902 hPa for minimum central pressure (figure 3b) and the theoretical intensification rates in 24 hours (equation 1) is higher than 220 km/h, however the maximum intensification rates observed in the system was about 85 km/h. From GFDL-CM4 SST outputs the calculated potential maximum wind speed is 325 km/h (figure 3a) and the potential minimum central pressure is 896 hPa (figure 3b). The simulated intensification rates is higher than 240 km/h in the same time lapse.

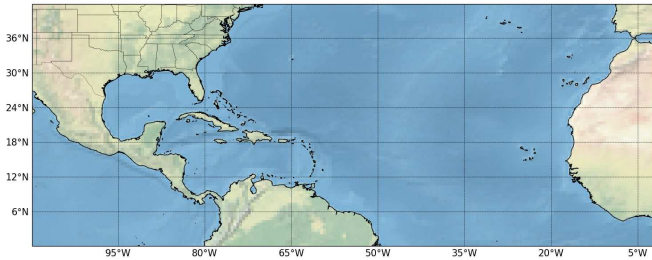


Figure 1. Study area

III. RESULTS

III.1. Hurricane Irma simulation

Hurricane Irma developed from a tropical wave originated in the west coast of Africa around August 30, 2017. The system, then a tropical depression, moved in a west-southwest direction, entering into an environment of low vertical wind shear, a low troposphere with high moisture content and a slightly warm sea surface temperature about 27°-28° C (figure 2). These conditions were favorable for a rapid intensification rates from tropical depression to hurricane in just 30 hours [34].

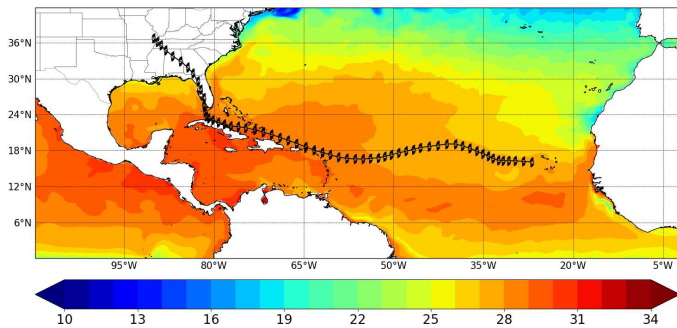


Figure 2. SST (Celsius degrees) from GFDL-CM4 for September 2017.

At the beginning of September 4, 2017, the system's eye grew in size with better definition and deep convection around the eye gained symmetry. Hurricane Irma was again in an intensification process, probably due to the end of a replacement cycle of the eyewall. Due to the breakdown of the western side of the mid-level anticyclonic ridge, the hurricane turned west-northwestward through another process of rapid intensification, reaching its maximum intensity of 914 hPa of minimum central pressure and 286 km/h of maximum wind speed [34].

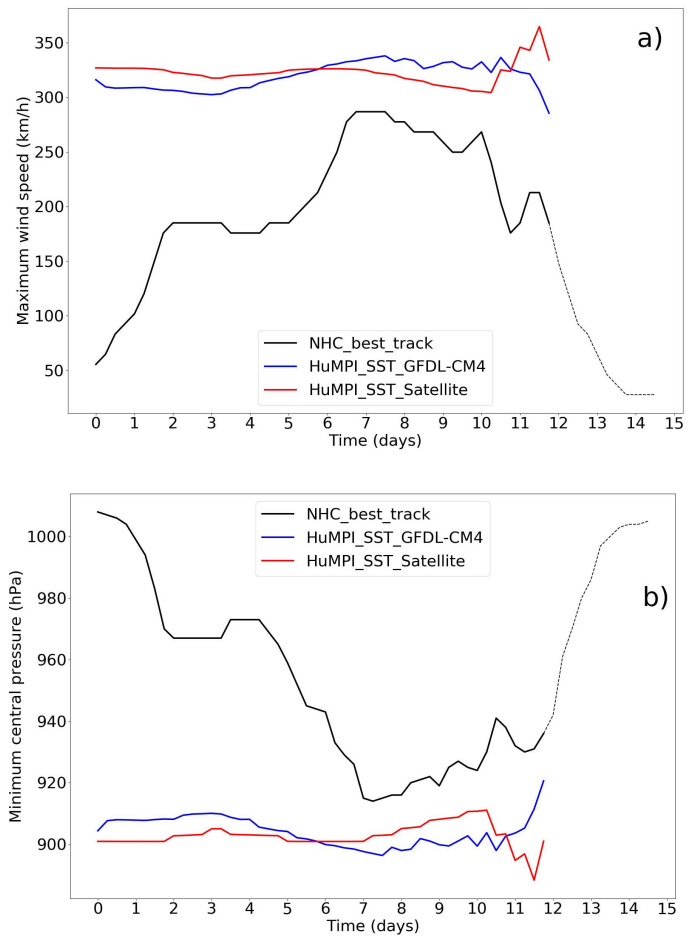


Figure 3. HuMPI simulation for Hurricane Irma (2017). (a) Potential maximum wind speed. (b) Potential minimum central pressure. Dotted lines represent the movement of the TC over land or very close to the coast. It was plotted Hurricane Irma track.

III.2. Hurricane Dorian simulation

Hurricane Dorian was formed from a tropical wave that moved westward. During its trajectory, the system moved over warm ocean waters with temperatures ranging between 27° and 29° C (figure 4), which made possible the rapid intensification processes that it developed during its life cycle.

Figure 5a shows that the maximum potential wind speed calculated with the HuMPI model from the SST obtained as satellite products is 313 km/h, while the value calculated from the SST obtained from the GFDL-CM4 is 302 km/h.

On the other hand, figure 5b shows that the calculated potential minimum central pressure is 904 hPa and 915 hPa, respectively. The above values are very similar to the intensity reached by Hurricane Dorian, 296 km/h of maximum wind speed and 910 hPa of minimum central pressure. Also the intensification rates experimented by Dorian were about 65 km/h in 24 hours while the simulated intensification rates is higher than 210 km/h in the same time lapse.

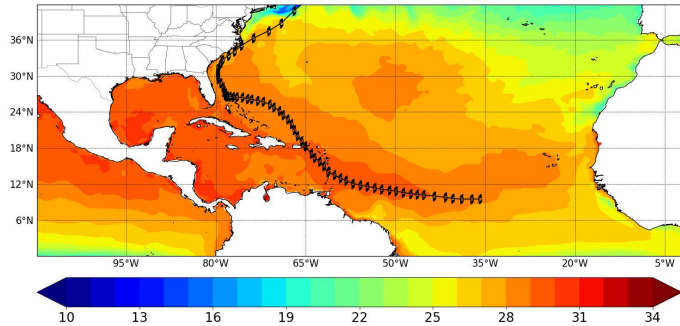


Figure 4. SST (Celsius degrees) from GFDL-CM4 for August 2019.

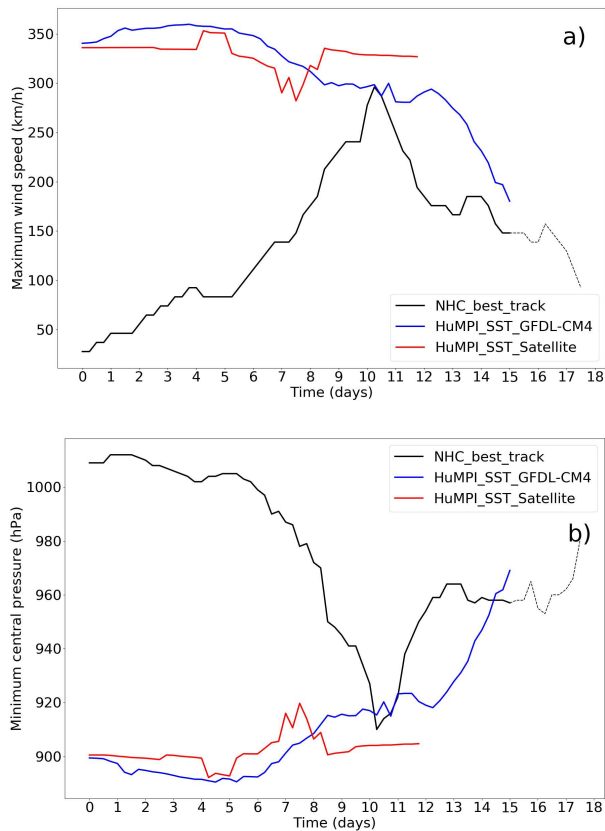


Figure 5. HuMPI simulation for Hurricane Dorian (2019). (a) Potential maximum wind speed. (b) Potential minimum central pressure. Dotted lines represent the movement of the TC over land or very close to the coast. It was plotted Hurricane Dorian track.

III.3. Hurricane Lorenzo simulation

Hurricane Lorenzo was formed from a tropical wave moving over the African coast around September, 22. Lorenzo initially moved between west and west-northwest due to the influence

of a subtropical ridge to the north. By September 25, the system increased its maximum winds from 130 km/h to 230 km/h in 48 hours.

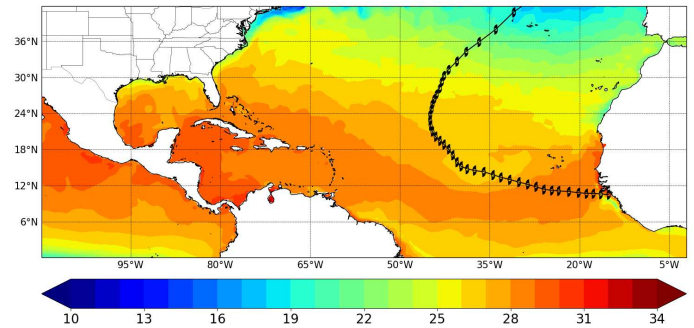


Figure 6. Mean SST (Celsius degrees) from GFDL-CM4 for September 2019.

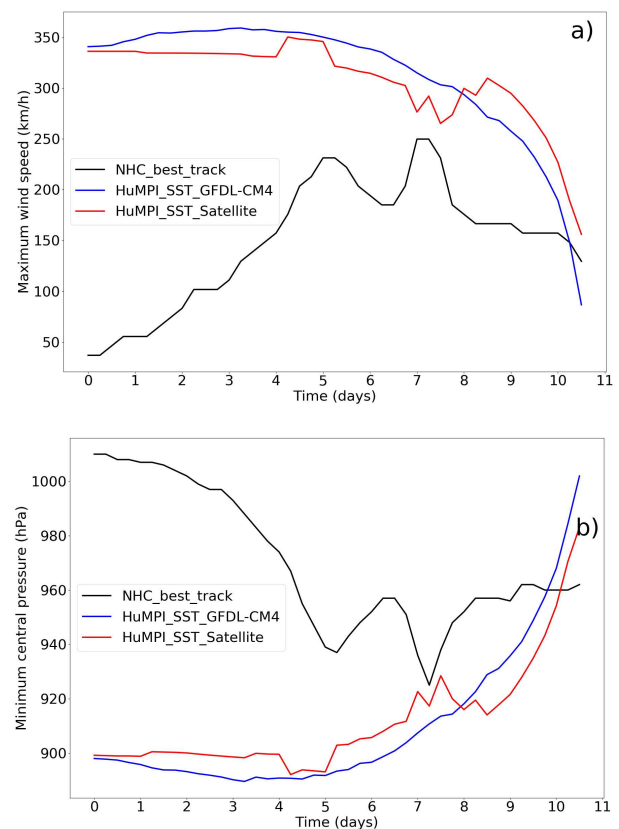


Figure 7. HuMPI simulation for Hurricane Lorenzo (2019). (a) SST Potential maximum wind speed. (b) Potential minimum central pressure. It was plotted Hurricane Lorenzo track.

The rupture of the subtropical ridge and the entry of dry air into inner core combined with a replacement cycle of the eyewall, caused Lorenzo to weaken slightly. For September 28 at 0600 UTC, Hurricane Lorenzo underwent another rapid intensification cycle by increasing the maximum wind speed by 75 km/h in just 21 hours, allowing it to reach its maximum intensity of 260 km/h and 925 hPa [35]. During this period the system was moving over warm ocean waters with a temperature that ranged between 26° -27° C (figure 6).

By September 29 at 1800 UTC, wind shear associated with an upper-level trough over the north-central Atlantic, and the

influx of drier mid-latitude air caused the system eyewall to collapse. This process and the ocean cooling from extensive upwelling associated with hurricane circulation, contributed to the weakening of Lorenzo's convective structure [35].

The HuMPI model, using SST from satellite products, simulated for Lorenzo the potential maximum wind speed is 290 km/h (figure 7a) and the potential minimum central pressure is 917 hPa (figure 7b), while for SST from GFDL-CM4 the potential maximum wind speed is 306 km/h (figure 7a) and the potential minimum central pressure is about 905 hPa (figure 7b). The intensity rates in 24 hours for Lorenzo applying equation (1) is greater than 200 km/h in 24 hours.

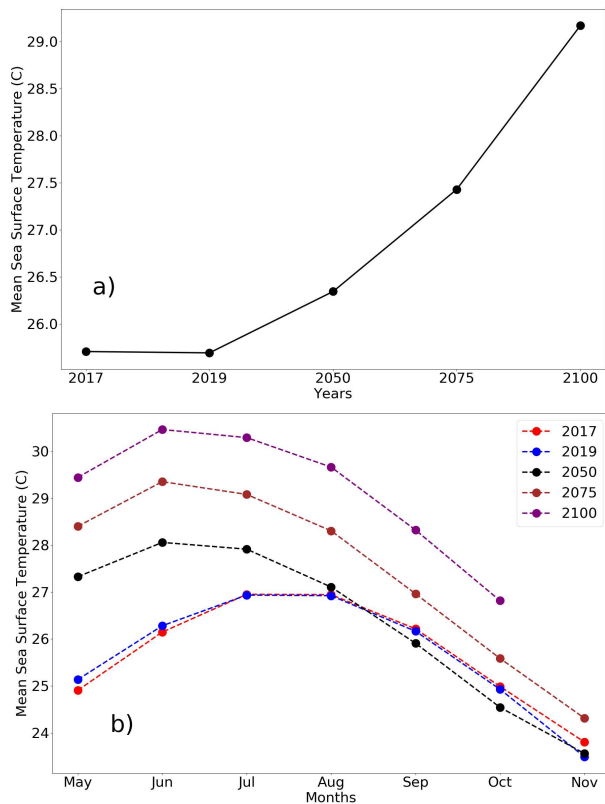


Figure 8. Mean SST (Celsius degrees) evolution from GFDL-CM4 . (a) annual (from May to November) (b) monthly

In summary, the results shown in Figures 3, 5 and 7 corroborate the ability of the HuMPI model to calculate the maximum potential intensity of hurricanes in NATL. Furthermore, it is easy to verify how the potential intensities calculated using the SST from GFDL-CM4 and the SST derived from satellite products show a similar behavior during the life cycle of the analyzed TCs. This result allows to use the GFDL-CM4 output to calculate de hurricane maximum potential intensity for 2050, 2075 and 2100.

III.4. SST evolution

Figure 8a shows the evolution of the mean SST from May to November in NATL over the area between the equator and 42° of latitude. This is the zone where TCs are formed

and intensified in NATL basin. It is remarkable how for 2100 occurs an increase in the mean SST of about 3° C respect to 2017. In fact, it is observed a continuous increase in the SST from 2017 to 2100. These results are in agreement with [36]. For a complete review of the GFDL-CM4 performance consult [36] and [29].

Figure 8b shows the mean SST from May to November. The maximum mean SST values are observed in July and August for 2017 and 2019, however, for 2050, 2075 and 2100 the maximum value is displaced to June and July, reaching values above 30° C for June 2100. This increase in SST has a proportional impact on the TC potential intensity.

This behavior demonstrates the significant impact that global warming has on ocean temperatures. For TC genesis, the SST must be higher than 26° Celsius [37–39]. The previous results show that in the coming decades this temperature threshold will be exceeded in larger ocean areas with greater depths. So, it will increase considerably the favorable oceanic conditions for TCs formation.

III.5. Hurricane potential intensity for 2050, 2075 and 2100

Figure 9 shows the potential intensity calculated for TCs in 2050. In general, it is easy to observe wind speeds larger than 300 km/h and the minimum central pressure below 890 hPa for June and July, in the area until 30° of latitude.

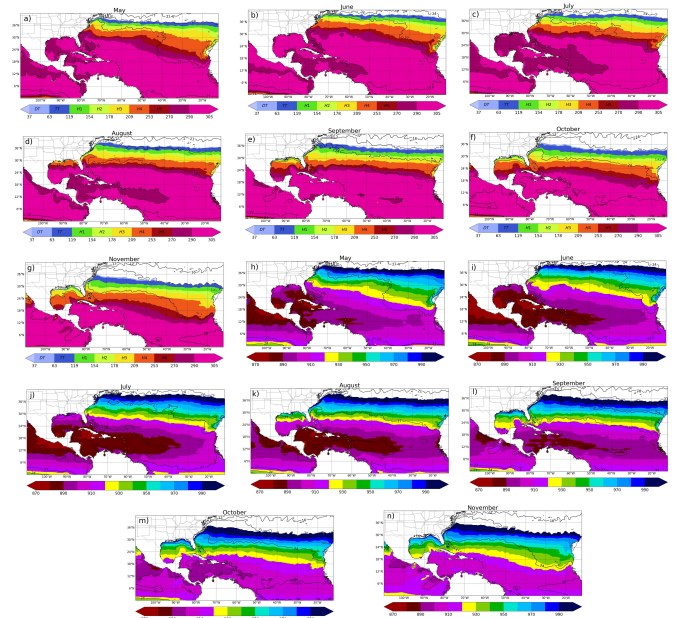


Figure 9. HuMPI outputs from May to November of 2050 with SST taken from GFDL-CM4. (a-g) Potential maximum wind speed (km/h). (h-n) Potential minimum central pressure (hPa).

TCs rarely occur outside the hurricane season (between June and November) [40], however, according to Fig. 9, it is remarkable to see the large values of MPI obtained for the month of May which may indicate an earlier start for future hurricane seasons. For October and November the extreme values are located in the Gulf of Mexico, the Caribbean Sea and the region between the Arc of the Lesser Antilles and the African coast. Nevertheless, intensities higher than those

of a category 3 hurricane on the Saffir-Simpson scale, can be reached at about 30° latitude.

For year 2075, figure 10 shows more regions with intensities higher than 312 km/h for wind speed and less than 880 hPa for minimum central pressure in June, July and August. For November the highest intensities are observed below 25° of latitude. This increasing of the maximum potential intensity of the TCs compared to 2050 is in correspondence with the rising of SST shown in figure 8.

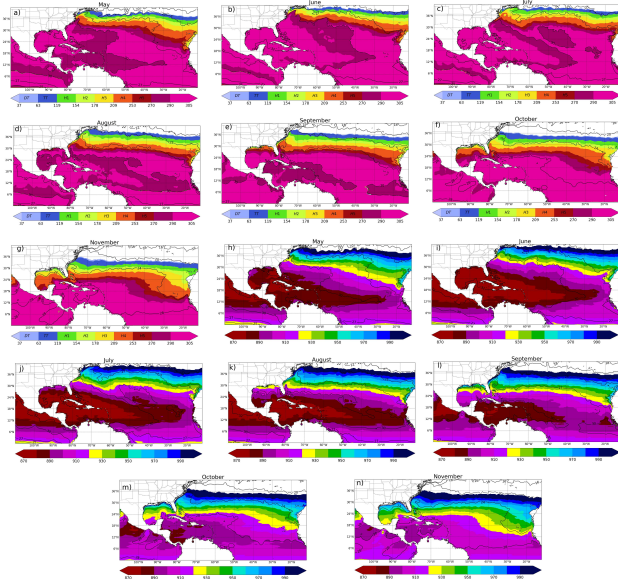


Figure 10. HuMPI outputs from May to November of 2075 with SST taken from GFDL-CM4. (a-g) Potential maximum wind speed (km/h). (h-n) Potential minimum central pressure (hPa).

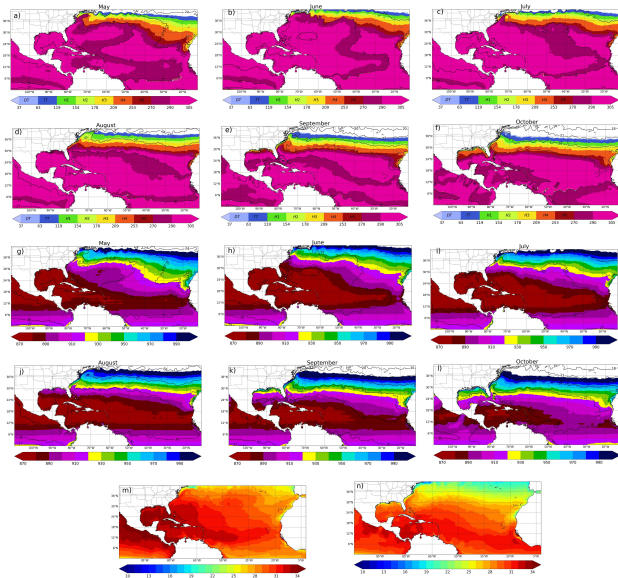


Figure 11. HuMPI outputs from May to October of 2100 with SST taken from GFDL-CM4. (a-f) Potential maximum wind speed (km/h). (g-l) Potential minimum central pressure (hPa). (m-n) SST (Celsius degree) for July and September of 2100.

The TC potential intensity calculated for 2100 has wind speeds larger than 325 km/h and a minimum central pressure lower than 870 hPa . For June, July and August it is observed that the extreme values in the maximum wind speed cover

more than 90% of the study area, while in the Caribbean Sea, Gulf of Mexico as well as the zone between 10° and 20° of latitude are observed the lowest values of the potential minimum central pressure (figure 11).

Figure 11m and Figure 11n show the SST for July and September. The SST in the Caribbean Sea, Gulf of Mexico and the coast of the Bahamas archipelago will be larger than 32° C on July. Also, SST values higher than 34° C are observed in some areas of them. For September a decreasing in the SST is observed, although SST is higher than 30° C .

Table 1 shows the TC theoretical intensification rates in 24 hours assuming that the TC development is not disturbed by detrimental environmental conditions such as vertical wind shear. It is remarkable the increasing of this rates, varying from 230 km/h in 2017 to values higher than 380 km/h in 2100.

Table 1. TC theoretical intensification rates in 24 hours applying equation (1). For this analysis, it was assumed a TC with a maximum wind speed of 185 km/h .

Years	Intensification rates
2017	230 km/h
2019	230 km/h
2050	270 km/h
2075	$\sim 320 \text{ km/h}$
2100	$> 380 \text{ km/h}$

IV. DISCUSSION

Figures 8 and 12 show the proportional dependency that exists between the MPI and the SST. Figure 12a shows a continuous increase in the mean MPI of the TC in NATL, reaching values about 340 km/h in maximum wind speed in 2100, while the minimum central pressure drops to 895 hPa (Figure 12b) by the end of this century.

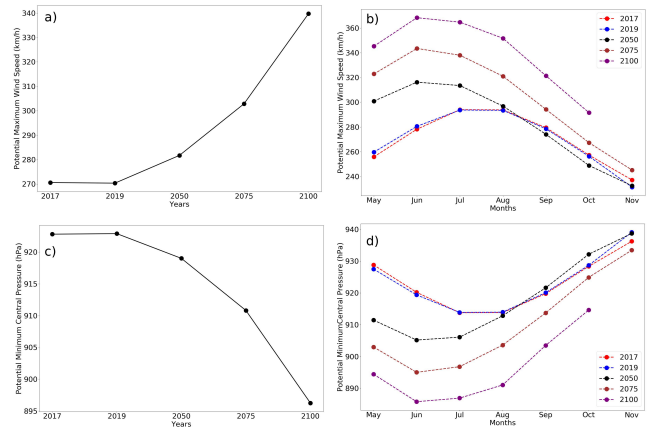


Figure 12. Mean TC maximum potential intensity. (a-b) maximum wind speed (c-d) minimum central pressure

Monthly is observed a displacement of the peaks of the mean MPI to June in 2050, 2075 and 2100 (figures 12c and 12d) as it was discussed in Section "Hurricane potential intensity for 2050, 2075 and 2100" respect to mean MPI in 2017 and 2019, in correspondence with what was observed in the trend of the mean SST (figure 8b).

The results presented in this research are consistent with the climatological effects of SST on the intensity and intensity changes of tropical cyclones. In fact, Cione and Uhlhorn [6] demonstrated that the changes in the SST are directly linked to TC intensity and suggested a relationship between inner core-ocean cooling and TC intensification. Indeed, the TC intensification extracting heat energy from the ocean surface [6, 12, 18] leads to an up-welling of colder deep waters that results in a cooling of the SST under the TC inner core [41].

For 2100, in the TC official season, it is observed an increase of approximately of 3° C in the mean SST respect to 2017, which have a direct impact on the TC intensification. That was demonstrated through the calculation of the MPI. Author in ref. [42] showed that the mean TC intensification increases by 16% for every 1° C increase in mean SST. Thus, based on our findings, hurricanes in 2100 will be 48% more intense than today.

Furthermore, the theoretical intensity rates in 24 hours are directly proportional to the MPI [25], so the largest intensity changes will be observed in the Caribbean Sea and the Gulf of Mexico. In these areas generally occur the processes of rapid intensification of hurricanes in the NATL [43]. Bhatia et al. [44] detected a slight increase in the TCs intensification rates in NATL with a positive contribution from anthropogenic forcing, however, they suggest the need for thorough studies to be able to detect a solid trend on a global scale. Additionally, figures 9, 10 and 11 show that the highest MPI are located in the intra-American Seas and the Western Atlantic Ocean. Strazzo et al. [45] found that TCs have greater sensitivity to changes in SST in these areas.

However, it is unclear the mechanism of the effect of global warming on the intensity of TCs. The increasing of SST will enhance the convection over the ocean and thus the upper troposphere tends to be warm due to more latent heat loss, which causes a more stable atmospheric stratification and inhibits the formation and development of TCs. Moreover, there is a negative feedback between the TCs and ocean: when TCs pass through the ocean, cold thermocline water is entrained into the mixed layer and SST decreases, leading to the decreasing of latent heat flux from ocean to atmosphere and weakens the intensity of TCs.

Additionally, future projections of TC activity are subjected to uncertainties in climate projections such as climate-forcing scenario and model dynamics and physics. According to Roberts et al. [46], the spatial resolution (~ 100 km) of climate models generally cannot simulate category 4-5 hurricanes, but higher-resolution global models (~ 10 - 100 -km of horizontal resolution) reproduce a more realistic TC structure. Despite these limitations, the findings of several authors [47-51] suggest an increase in the TC intensity with global warming, as we found here. Conversely, other studies [52-55] have addressed that the frequency of TCs increases with global warming, but not TC intensity.

In summary, the increase in the TCs intensity due to global warming will cause that TCs will have a better define convective structure and therefore an increase in rainfall associated to them. This phenomena, together with the rising

of the sea level due to the melting-ice, would cause serious damage to the Caribbean Islands and to the all coastal population affected annually by TCs. As a consequence, an increase in economic damage would occur due to the displacement of people and their goods to safe places, as well as the damage to the infrastructures located in the coastal zone.

V. CONCLUSIONS

An attempt is made to understand the consequences of increase of SST due to climatic change in TC intensity and intensification rates by performing numerical simulations with HuMPI model. Like [18, 56, 57], the HuMPI model predicts an increase of the maximum potential intensity with increasing SST. Indeed, the impact of the SST on the maximum potential intensity of the TCs was again verified.

Thus, future TCs will have higher wind speeds. By the end of the 21st Century, the peak of the MPI will be observed in June, while the Caribbean Sea and Intra-American Seas could be the areas where the TCs would reach the maximum potential intensity. In addition, a significant increase in intensification rates in 24 hours will be expected for 2100 and the mean MPI will be 30% higher at the end of this century than today.

Finally, given the impact that tropical cyclones have on the social and economic life of people, it is necessary to continue to develop research to determine the impact of global warming on both the intensity and frequency of tropical cyclones, especially those that reach higher intensity than a category 3 hurricane on the Saffir-Simpson scale.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors acknowledge the availability of public datasets from the GFDL-CM4 model and the U. S National Climatic Data Center. The authors also owe thanks to Alfo José Batista-Leyva from the Department of Atomic and Molecular Physics, Higher Institute of Technology and Applied Sciences, University of Havana and Rogert Sorí-Gómez from the Environmental Physics Laboratory, Faculty of Science, University of Vigo, for their recommendations and suggestions.

REFERENCES

- [1] T. Knutson, J. McBride, J. Chan, K. Emanuel, G. Holland, C. Landsea, I. Held, J. Kossin, K. Srivastava, M. Sugi, *Nat. Geosci.* **3**, 157 (2010).
- [2] E. N. Rappaport, J.-G. Jiing, C. W. Landsea, S. T. Murillo, J. L. Franklin, *Bull. Am. Meteorol. Soc.* **93**, 371 (2012).
- [3] K. Balaguru, G. R. Foltz, L. R. Leung, S. M. Hagos, D. R. Judi, *Weather Forecasting* **33**, 411 (2018).
- [4] L. F. Bosart, W. E. Bracken, J. Molinari, C. S. Velden, P. G. Black, *Mon. Weather Rev.* **128**, 322 (2000).
- [5] L. K. Shay, G. J. Goni, P. G. Black, *Mon. Weather Rev.* **128**, 1366 (2000).

- [6] J. J. Cione and E. W. Uhlhorn, *Mon. Weather. Rev.* **131**, 1783 (2003).
- [7] J. Kaplan and M. DeMaria, Climatological and synoptic characteristics of rapidly intensifying tropical cyclones in the North Atlantic basin. Preprints 23rd Conf. on Hurricanes and tropical Meteorology, Dallas, TX (1999).
- [8] M. Sitkowski, J. P. Kossin, C. M. Rozok, *Mon. Weather Rev.* **139**, 3829 (2011).
- [9] S. Gao, S. Zhai, L. S. Chiu, D. Xia, *J. Appl. Meteorol. Climatol.* **55**, 425 (2016).
- [10] R. L. Elsberry, L. Chen, J. Davidson, R. Rogers, Y. Wang, L. Wu, *Trop. Cyclone Res. Rev.* **2**, 13 (2013).
- [11] G. J. Holland, R. T. Merrill, *Q. J. R. Meteorolog. Soc.* **110**, 723 (1984).
- [12] G. J. Holland, *J. Atmosph. Scie.* **54**, 2519 (1997).
- [13] K. Balaguru, P. Chang, R. Saravanan, L. R. Leung, Z. Xu, M. Li, J.-S. Hsieh, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **109**, 14343 (2012).
- [14] S. A. Grodsky, N. Reul, G. Lagerloef, G. Reverdin, J. A. Carton, B. Chapron, Y. Quilfen, V. N. Kudryavtsev and H.-Y. Kao, *Geophys. Res. Lett.* **39**, (2012).
- [15] C. Maes, T. J. O'Kane, *J. Geophys Res C: Oceans* **119**, 1706 (2014).
- [16] E. Kleinschmidt, *Meteorol. Atmos. Phys.* **4**, 53 (1951).
- [17] J. S. Malkus and H. Riehl, *Tellus* **12**, 1 (1960).
- [18] K. A. Emanuel, *J. Atmos. Sci.* **43**, 585 (1986).
- [19] J. Xu, Y. Wang, *Weather Forecasting* **33**, 523 (2018).
- [20] E. D. Gutmann, R. M. Rasmussen, C. Liu, K. Ikeda, C. L. Bruyere, J. M. Done, L. Garre, P. Friis-Hansen, V. Veldore, *J. Clim.* **31**, 3643 (2018).
- [21] M. E. Mann and K. A. Emanuel, *EOS Trans. Am. Geophys. Union* **87**, 233 (2006).
- [22] R. Mendelsohn, K. Emanuel, S. Chonabayashi, L. Bakkensen, *Nat. Clim. Change* **2**, 205 (2012).
- [23] K. A. Emanuel, *Weather Clim. Soc.* **3**, 261 (2011).
- [24] K. A. Emanuel, *J. Atmos. Sci.* **69**, 988 (2012).
- [25] K. A. Emanuel, *Bull. Am. Meteorol.* **98**, 495 (2017).
- [26] I. M. Held, *et al.* *J. Adv. Model Earth Syst.* **11**, 3691 (2019).
- [27] A. Perez-Alarcón, Diploma Thesis Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Havana, July, 2015 (2015).
- [28] A. Perez-Alarcón, J. C. Fernández-Alvarez and O. Díaz-Rodríguez, *Rev. Cubana Fis.* **38**, 85 (2021).
- [29] M. Winton, *et al.*, *J. Adv. Model Earth Syst.* **12**, e2019MS001838 (2020).
- [30] H. Guo, *et al.*, NOAA-GFDL GFDL-CM4 model output (2018).
- [31] K. Hayhoe, J. Edmonds, R. E. Kopp, A. LeGrande, B. Sanderson, M. Wehner, D. Wuebbles, In: *Climate Science Special Report: Fourth National Climate Assessment I*, 133 (2017).
- [32] R. K. Smith, *Q. J. R. Meteorolog Soc.* **129**, 1007 (2003).
- [33] J. C. Fernández-Alvarez, O. D. Rodríguez, A. Pérez-Alarcón, *Rev. Bras. Met.* **34**, 101 (2019).
- [34] P. J. Cangialosi, A. S. Latto, R. Berg, National Hurricane Center Tropical Cyclone Report. Hurricane Irma, Technical report, National Hurricane Center (2018).
- [35] D. A. Zelinsky, National Hurricane Center Tropical Cyclone Report. Hurricane Lorenzo, Technical report, National Hurricane Center (2019).
- [36] C. Murphy, P. Gardoni and R. McKim, *Climate Change and Its Impacts Risks and Inequalities, Climate Change Management* (Springer International Publishing AG, Gewerbestrasse 11, 6330 Cham, Switzerland, 2018).
- [37] W. Gray, *Mon. Weather Rev.* **96**, 669 (1968).
- [38] W. Gray, *Meteorol. Atmos. Phys.* **67**, 37 (1998).
- [39] R. A. Dare and J. L. McBride, *J. Clim.* **24**, 4570 (2011).
- [40] H. Ramsay, Oxford University Press (2017).
- [41] S. Jullien, P. Marchesiello, C. E. Menkes, J. Lefevre, N. C. Jourdain, G. Samson, M. Lengaigne, *Clim. Dyn.* **43**, 2831 (2014).
- [42] E. Fraza, J. B. Elsner, *Prog. Phys. Geogr.* **36**, 395 (2015).
- [43] P. H. Yaukey, *Int. J. Climatol.* **34**, 1038 (2014).
- [44] K. T. Bhatia, G. A. Vecchi, T. R. Knutson, H. Murakami, J. Kossin, K. W. Dixon, C. E. Whitlock, *Nat. Commun.* **10**, 635 (2019).
- [45] S. Strazzo, J. B. Elsner, J. C. Trepanier, K. A. Emanuel, *J. Adv. Model Earth Syst.* **5**, 500 (2013).
- [46] M. Roberts, P. Vidale, C. Senior, H. Hewitt, C. Bates, S. Berthou, P. Chang, H. Christensen, S. Danilov, M.-E. Demory *et al.*, *Bull. Am. Meteorol. Soc.* **99**, 2341 (2018).
- [47] K. Emanuel, R. Sundararajan and J. Williams, *Bull. Am. Meteorol. Soc.* **89**, 347 (2008).
- [48] K. Emanuel and A. Sobel, *J. Adv. Model. Earth Syst.* **5**, 447 (2013).
- [49] J. V. Manganello, *et al.*, *J. Clim.* **27**, 7622 (2014).
- [50] K. Balaguru, G. R. Foltz, L. R. Leung and K. A. Emanuel, *Nat. Commun.* **7**, 1 (2016).
- [51] T. Knutson, S. Camargo, J. Chan, E. Kerry, H. Chang-Hoi, K. James, M. Mrutyunjay, S. Masaki, S. Masato, W. Kevin *et al.*, *Bull. Am. Meteorol. Soc.* **10**, 303 (2019).
- [52] S. J. Camargo, *J. Clim.* **26**, 9880 (2013).
- [53] H. Murakami, P.-C. Hsu, O. Arakawa, T. Li, *J. Clim.* **27**, 2159 (2014).
- [54] M. Wehner, *et al.*, *J. Clim.* **28**, 3905 (2015).
- [55] K. Bhatia, G. Vecchi, H. Murakami, S. Underwood, J. Kossin, *J. Clim.* **31**, 8281 (2018).
- [56] B. I. Miller, *J. Meteorol.* **15**, 184 (1958).
- [57] K. A. Emanuel, *J. Atmos. Sci.* **45**, 1143 (1988).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



MODELO DE INTENSIDAD POTENCIAL MÁXIMA DE HURACANES

HURRICANE MAXIMUM POTENTIAL INTENSITY MODEL

A. PÉREZ-ALARCÓN^{a†}, J.C. FERNÁNDEZ-ALVAREZ^a, O. DÍAZ-RODRÍGUEZ^b

a) Departamento de Meteorología, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Universidad de La Habana, Cuba; albenisp@instec.cu[†]

b) Centro de Ciencias de la Atmósfera, Universidad Autónoma de México. México

† autor para la correspondencia

Recibido 18/2/2021; Aceptado 15/10/2021

A radial pressure profile was incorporated into the HuMPI (Hurricane Maximum Potential Intensity) model that guarantees a direct physical relationship between the calculation of the minimum central pressure and the maximum potential wind speed. The simulations carried out for Hurricanes Matthew and María show that the intensity reached by these systems was approximately 92 % of the maximum potential intensity (MPI), while the intensification of Hurricane Michael very close to the southern coast of the United States, reaching an intensity slightly higher than the MPI, evidenced the uncertainties in the knowledge of the physical mechanisms that control the intensification and weakening processes of tropical cyclones, as well as limitations of HuMPI model to estimate the MPI when the sea surface temperature is slightly cold. Furthermore, it was observed that the regions where the study cases reached the maximum intensity coincided with the areas predicted by HuMPI and with regions of the highest sea surface temperature through which the TCs moved. Overall, the results obtained demonstrate the physical consistency of the model to correctly calculate the maximum potential intensity of hurricanes.

Se incorporó al modelo de intensidad potencial de huracanes HuMPI (Hurricane Maximum Potential Intensity) un perfil radial de presión que garantiza una relación física directa entre el cálculo de la presión mínima central y la velocidad máxima del viento. En las simulaciones realizadas para los huracanes Matthew y María la intensidad real alcanzada fue aproximadamente el 92% de intensidad máxima potencial (IMP) estimada, mientras que la intensificación del huracán Michael que ocurrió muy próxima a la costa sur de los Estados Unidos, alcanzando una intensidad ligeramente superior a la IMP, evidenció las incertidumbres en el conocimiento de los mecanismos físicos que controlan los procesos de intensificación y debilitamiento de los ciclones tropicales, así como limitaciones del modelo HuMPI para estimar la IMP cuando la temperatura superficial del mar es ligeramente fría. Por otro lado, se observó que las regiones donde los casos de estudio alcanzaron la máxima intensidad coincidieron con las zonas previstas por HuMPI, y a su vez, con las regiones de mayor temperatura superficial del mar por las cuales transitaban los CTs. De forma general, los resultados obtenidos demuestran la consistencia física del modelo para calcular correctamente la intensidad máxima potencial de los huracanes.

PACS: Global warming, (calentamiento global), 92.30.Np, 92.70.Mn; weather analysis and prediction (análisis y predicción del clima), 92.60.W; Climate change and variability (cambio y variabilidad del clima), 92.70.Np

I. INTRODUCCIÓN

Los ciclones tropicales (CTs) son uno de los fenómenos más propensos a ocasionar desastres naturales por el impacto de fuertes vientos, intensas precipitaciones, marea de tormenta y las inundaciones costeras [1]. En los últimos años se ha observado a nivel mundial un incremento de la población que habita cerca de las costas, lo cual aumenta la vulnerabilidad ante las afectaciones producidas por los CTs [2]. Esta situación condiciona la necesidad de contar con pronósticos de CTs más precisos. En las últimas décadas ha ocurrido una disminución significativa de los errores en el pronóstico de su trayectoria, sin embargo, no se ha logrado el mismo progreso en el pronóstico de la intensidad. Esta limitación se atribuye a una representación incompleta de los mecanismos dinámicos y termodinámicos que controlan los procesos de intensificación y debilitamiento de los CTs, la baja resolución espacial de los modelos de pronóstico numérico del tiempo [3, 4] y la incertidumbre en las condiciones iniciales y de frontera [5, 6].

Existen numerosas teorías para determinar la intensidad máxima potencial (IMP) de los ciclones tropicales [7], que no están exentas de limitantes. Kleinschmidt [8] desarrolló un

modelo de ciclón tropical basado en la analogía del ciclo termodinámico del huracán al de un motor de Carnot. Miller [9] elaboró una teoría de intensidad potencial controlada por la temperatura superficial del mar y la altura del nivel de equilibrio convectivo, mientras que Malkus y Rielh [10], no solo consideraron la caída de presión por calentamiento en la pared del ojo según Miller [9] sino que tomaron en cuenta el aporte que producía la distribución anómala de la temperatura virtual.

Según Camp and Montgomery [11], una de las teorías más aceptadas para la predicción de la intensidad máxima potencial de los huracanes es la Teoría de Emanuel [12]. En esta teoría, se describen los principales procesos dinámicos y termoenergéticos considerando el ciclo energético del ciclón como un motor de Carnot, que absorbe el calor del océano, cediéndolo en la tropopausa.

Debido a la naturaleza altamente no lineal de las ecuaciones de Navier-Stokes, surge la pregunta de si la solución de IMP de estado estable descrita por Emanuel [12] es alcanzable en la atmósfera real. Investigaciones recientes han aportado nuevas modificaciones a la teoría original, incorporando la generación y disipación de la energía cinética dentro de la capa límite

atmosférica [13–15].

Precisamente, Pérez-Alarcón [16] desarrolló el modelo HuMPI (Hurricane Maximum Potential Intensity), el cual es una modificación de la teoría de intensidad potencial de Emanuel [12], a partir de considerar el ciclo termoenergético del CT como un motor de Carnot generalizado. Además incluye un modelo de ciclón tropical para la capa frontera atmosférica.

El conocimiento de la máxima intensidad que puede alcanzar un CT, cuando las condiciones ambientales son completamente favorables para su desarrollo e intensificación, es de vital importancia para los pronosticadores en el objetivo de minimizar las pérdidas económicas y de vidas humanas. Además, permite a los tomadores de decisiones, la planificación de estrategias para la reducción de la vulnerabilidad en las zonas expuestas a los principales efectos de los CTs. En esta investigación se presentan nuevas correcciones al modelo HuMPI a partir de la incorporación del perfil radial de presión basado en el perfil radial de viento de Willoughby et al. [17], desarrollado por Fernández-Alvarez et al. [18].

1.1. Modelo HuMPI

Se supone que los procesos que ocurren en un huracán son reversibles internamente, mientras que en los intercambios de calor con el ambiente no perturbado es donde acontece la irreversibilidad. Asumiendo entonces, que el flujo de calor desde la superficie del mar hacia el tope de la capa frontera y el flujo de salida hacia el ambiente no perturbado son los únicos procesos irreversibles, el ciclo termoenergético del ciclón tropical puede representarse como un ciclo de Carnot generalizado, extrayendo energía de la superficie marina y cediéndola en la tropopausa.

El flujo entrante en la capa límite atmosférica corresponde a un proceso isotérmico a una temperatura T_b , en el cual el aire está humectándose por efecto de la evaporación del agua de la superficie oceánica. Esto significa que se debe añadir calor al aire entrante, ya que de otra forma la acción de la expansión adiabática seca (debida a la caída de la presión en la superficie) y del enfriamiento evaporativo reducirían la temperatura ambiente en el tope de la capa frontera.

En una formulación estricta del ciclo de Carnot generalizado, el calor agregado para mantener el aire en el tope de la capa frontera en condiciones isotérmicas proviene de los flujos turbulentos de calor desde la superficie oceánica y de la liberación de calor ocasionada por la desaceleración friccional del viento a medida que sopla en la capa frontera. En este proceso el aire se carga de humedad aumentando la energía estática húmeda y es forzado a ascender en la pared del ojo adiabáticamente. A medida que el aire asciende, fluye con una buena aproximación a lo largo de superficies de momento angular constante y posteriormente fluye hacia el exterior mediante una transformación isotérmica; luego se distribuye lejos del eje de rotación donde se mezcla levemente con el aire del ambiente no perturbado. El ciclo se cierra con una línea vorticial absoluta.

1.2. Cálculo de la velocidad máxima potencial del viento en el tope de la capa frontera

La velocidad máxima potencial del viento (V_{max}) en el tope de la capa frontera, en función de la temperatura del aire en este nivel (T_b) y la temperatura del flujo de salida en la tropopausa (T_{00}) se define como:

$$V_{max}^2 = \frac{T_b - T_{00}}{T_b} \frac{C_k}{C_d} (h_s^* - h) \quad (1)$$

donde C_d es el coeficiente de arrastre, C_k es el coeficiente de intercambio térmico, h_s^* es la energía estática húmeda de saturación en la superficie del mar y h es la energía estática húmeda del aire en el tope de la capa límite. La expresión anterior es una modificación desarrollada por Pérez-Alarcón [16] de la expresión original obtenida por Emanuel [12]. Aplicando, el principio de cuasiequilibrio en la capa frontera se iguala h en la ecuación (1) a la energía estática húmeda saturada justo por encima del tope de la misma (h_b^*). Las variaciones de h_b^* a una misma altura están relacionadas con el cambio de la entropía de saturación por la primera ley de la termodinámica. A partir de estas consideraciones se obtiene:

$$\alpha_1 V_{max}^2 + \alpha_2 V_{max} + \alpha_3 = 0 \quad (2)$$

donde

$$\alpha_1 = 1 - \frac{1}{2} \frac{C_k}{C_d} \quad (3)$$

$$\alpha_2 = -\frac{1}{2} \frac{C_k}{C_d} f r_m \quad (4)$$

$$\alpha_3 = -\frac{T_b - T_{00}}{T_b} \frac{C_k}{C_d} (h_s^* - h_a) - \frac{C_k}{C_d} T_{00} R_d \ln \frac{P_m}{P_a} + \frac{1}{4} \frac{C_k}{C_d} f^2 r_a^2 \quad (5)$$

En estos coeficientes r_m es el radio de vientos máximos, r_a es el límite exterior del vórtice, P_m es la presión en el radio de vientos máximos, f es el parámetro de Coriolis, R_d es la constante de los gases para el aire seco, P_a representa la presión atmosférica en el radio r_a y h_a es la energía estática húmeda en la capa frontera. Resolviendo la ecuación (2) y considerando únicamente la solución positiva, que es la que tiene sentido físico, se obtiene entonces una expresión para el cálculo de la velocidad máxima del viento en el tope de la capa frontera.

$$V_{max} = \frac{-\alpha_2 + \sqrt{(\alpha_2)^2 - 4\alpha_1\alpha_3}}{2\alpha_1} \quad (6)$$

Además, es importante destacar que matemáticamente la ecuación (6) no brinda una solución con sentido físico cuando el término dentro del radical es menor que cero. Teniendo en cuenta la formulación de los coeficientes α_1 , α_2 y α_3 involucrados en la ecuación (6), a continuación brindamos una breve interpretación física dada las condiciones de validez matemática. La razón $\frac{C_k}{C_d}$ generalmente se considera constante. Estudios previos [19–21] utilizaron $\frac{C_k}{C_d} = 0,9$ al calcular la IMP empleando el modelo de Emanuel [12], sin embargo,

por simplicidad en HuMPI se asumió $\frac{C_k}{C_d} = 1$, por tanto α_1 siempre será positivo. Por otro lado, el término relacionado con α_2 dentro del radical en la ecuación (6), al estar elevado al cuadrado siempre será positivo, por tal motivo, si $\alpha_3 < 0$, la solución de la ecuación para V_{max} tiene sentido físico. El último término de α_3 ($+\frac{1}{4}\frac{C_k}{C_d}f^2r_a^2$) siempre será positivo, mientras que la relación $\frac{P_m}{P_a}$ en el término intermedio de α_3 ($-\frac{C_k}{C_d}T_{00}R_d \ln \frac{P_m}{P_a}$) será menor que la unidad debido a que los CTs son sistemas de bajas presiones, y la presión atmosférica en el radio de vientos máximos es menor que la presión atmosférica en la periferia del vórtice, por lo que este término igualmente será mayor que cero. Como la temperatura en el tope de la capa fronteriza (T_b) es mayor que la temperatura del flujo de salida (T_{00}), entonces el signo del primer término de α_3 ($-\frac{T_b-T_{00}}{T_b}\frac{C_k}{C_d}(h_s^* - h_a)$) y a su vez el signo de α_3 están condicionados por el desequilibrio termodinámico ($h_s^* - h_a$).

El desequilibrio termodinámico ($h_s^* - h_a$) será positivo siempre que la energía estática húmeda de saturación se incremente hacia interior del sistema y sea mayor que la energía estática húmeda en el ambiente no perturbado. Además, una disminución de la presión central determina un aumento de la intensidad y por tanto mayor intercambio de entalpía y momento con el océano, manteniendo la relación $h_s^* - h_a > 0$. Sin embargo, si ocurre una perturbación local de la temperatura superficial del mar con una disminución de 2.5 °C, es suficiente para que $h_s^* - h_a \rightarrow 0$ [12], y por tanto $\alpha_3 > 0$, lo que conduce a que la solución para V_{max} no tenga sentido físico. De forma similar, un enfriamiento de la superficie oceánica aproximadamente de 1.0 °C bajo el núcleo del CT, puede provocar cambios en la intensidad del huracán y un debilitamiento del desequilibrio termodinámico.

Como V_{max} se estima a partir de la ecuación (6) en el tope de la capa fronteriza, y la intensidad de los CTs es medida como el viento medio sostenido en superficie durante uno o diez minutos, según la cuenca ciclogénica, el modelo HuMPI incorpora un modelo de CT en la capa fronteriza. Entonces, una vez estimada V_{max} , se realiza la integración completa de las ecuaciones de la capa fronteriza a través de un espesor constante δ para obtener el perfil potencial de velocidades de un CT en superficie, y por tanto la velocidad máxima potencial. La incorporación del modelo de CT en la capa fronteriza al modelo HuMPI es otra diferencia sustancial respecto a la teoría original de Emanuel [12] para el cálculo de la IMP.

1.3. Modelo de ciclón tropical en la capa fronteriza atmosférica

La capa fronteriza atmosférica juega un papel importante en la dinámica del huracán, tiene aproximadamente unos 500 metros de espesor [23] y es donde los efectos de la superficie influyen de manera directa en el flujo del aire. Asumiendo la aproximación del *plano-f*, que considera constante el parámetro de Coriolis (f) para pequeñas variaciones de la latitud [24], las ecuaciones de movimiento de la capa fronteriza en coordenadas cilíndricas, aplicadas a un vórtice

axialmente simétrico y estable, son:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(ru^2)}{\partial r} + \frac{\partial(uw)}{\partial z} + \frac{v_{gr}^2 - v^2}{r} + f(v_{gr} - v) = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (7)$$

Además se tiene que:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 uv)}{\partial r} + \frac{\partial(vw)}{\partial z} + fu = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (8)$$

$$\frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{\partial(rw)}{\partial z} = 0 \quad (9)$$

donde (u, v, w) es el vector velocidad en un sistema de coordenadas cilíndricas, v_{gr} es la velocidad tangencial del viento en el tope de la capa fronteriza y K es un coeficiente de difusividad. Integrando las ecuaciones anteriores desde $z = 0$ hasta $z = \delta$ asumiendo que δ es un valor constante, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones [23]:

$$\frac{\partial u}{\partial r} = \frac{w_{\delta-} + w_{sc}}{\delta} + \frac{v_{gr}^2 - v^2}{ru} - f \left(\frac{v_{gr} - v}{\delta} \right) - \frac{C_d}{\delta} \sqrt{u^2 + v^2} \quad (10)$$

$$\frac{\partial v}{\partial r} = \frac{w_{\delta-} + w_{sc}}{u\delta} (v_{gr} - v) - \left(\frac{v}{r} + f \right) - \frac{C_d}{u\delta} \sqrt{u^2 + v^2} \quad (11)$$

donde (u, v) es el vector velocidad en superficie, w_{δ} es el valor de la velocidad vertical en el tope de la capa fronteriza, w_{sc} es el término que involucra el aporte de la convección poco profunda a la velocidad en superficie, δ el espesor de la capa fronteriza.

La velocidad tangencial del viento en el tope de la capa fronteriza se calcula mediante el perfil radial de viento obtenido por Willoughby et al. [17], definido como:

$$v_{gr} = \begin{cases} V_{max} \left(\frac{r}{r_m} \right)^n & r \leq r_1 \\ V_i(1 - w_1) + V_0 w_1 & r_1 \leq r \leq r_2 \\ V_{max} \Lambda & r > r_2 \end{cases} \quad (12)$$

donde:

$$\Lambda = (1 - A)e^{-\frac{r-r_m}{X_1}} + Ae^{-\frac{r-r_m}{X_2}} \quad (13)$$

Los términos n, A, X_1 y X_2 son parámetros relacionados con la intensidad del CT, V_i y V_0 son las velocidades tangenciales en los radios r_1 y r_2 respectivamente, y w_1 es una función de peso (para más información consulte la ref. [17]).

A lo largo de los años, se han desarrollado varios modelos de perfiles de viento paramétricos para representar perfiles radiales idealizados del viento tangencial, representativos de un CT (ejemplo, Holland [25], DeMaria [26], Willoughby et al. [17], Frisius y Scgönemann [27]). Sin embargo, el perfil de viento desarrollado por Willoughby et al. [17] fue diseñado específicamente para ajustarse a las observaciones del viento y ha sido ampliamente probado con datos obtenidos a partir de aviones de reconocimiento [28]. Además permite un ajuste óptimo a los perfiles de viento más complejos. Como se muestra en la ecuación (12), el perfil de Willoughby et al. [17] utiliza un perfil de viento seccionalmente continuo

que comprende una ley de potencia dentro del ojo y dos funciones de decaimiento exponencial en el exterior, así como un polinomio que suaviza la transición a través del radio de viento máximos. Adicionalmente, este perfil no está condicionado por la validez de balances de fuerza idealizados, por lo que se ajusta mejor a las condiciones reales de un ciclón tropical.

Además, la factibilidad de utilizar el perfil radial de viento de Willoughby et al. [17] para forzar el modelo de capa fronteriza de Kepert y Wang [29] fue demostrada por Ramsay et al. [30], por Kepert [31] en un estudio de caso para el huracán Mitch (1998) y por Schwendike y Kepert [32] para estudios de casos con los huracanes Danielle (1998) e Isabel (2003). Por otro lado, Pérez-Alarcón et al. [16] realizó un análisis comparativo del perfil radial de viento del Huracán Iván (formado en la cuenca del Atlántico Norte en 2004), y concluyó que el perfil de Willoughby et al. [17] es el que mejor se ajustó a la distribución radial de la velocidad tangencial del Huracán Iván. Teniendo en cuenta estos resultados anteriores, se utilizó el perfil radial de Willoughby et al. [17] en el modelo HuMPI.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

II.1. Perfil radial de presión

Fernández-Alvarez et al. [18] desarrollaron un perfil radial de presión a partir del perfil radial de viento de Willoughby et al. [17] (ecuación 12) y la ecuación de balance de viento gradiente, lo que garantiza una relación física directa entre la presión mínima central y la velocidad máxima del viento en superficie. La ecuación de balance de viento gradiente se define como:

$$v_{gr} = \frac{-fr}{2} + \sqrt{\frac{1}{4}(r^2 f^2) + \frac{r}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r}} \quad (14)$$

donde ρ es la densidad del aire. Se considera que el viento para cada intervalo del perfil es igual al viento gradiente. Para el primer tramo se obtiene la siguiente expresión:

$$V_{max} \left(\frac{r}{r_m} \right)^n = -\frac{fr}{2} + \sqrt{\frac{1}{4}(r^2 f^2) + \frac{r}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r}} \quad (15)$$

Posteriormente se despeja la derivada parcial de la presión con respecto al radio obteniéndose:

$$\frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\rho}{r} \left[V_{max} \left(\frac{r}{r_m} \right)^n + \frac{fr}{2} \right]^2 - \frac{\rho r f^2}{4} \quad (16)$$

Luego se desarrolla esta expresión y se obtiene para el intervalo $r \leq r_1$ la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\rho V_{max}^2}{r} \left(\frac{r}{r_m} \right)^{2n} + fr V_{max} \left(\frac{r}{r_m} \right)^n \quad (17)$$

Para el segundo intervalo donde $r_1 \leq r \leq r_2$ se realiza un procedimiento similar al anterior y se obtiene:

$$\frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\rho}{r} \left[V_i(1 - w_1) + V_0 w_1 + \frac{fr}{2} \right]^2 - \frac{\rho r f^2}{4} \quad (18)$$

Finalmente, la ecuación para el tercer intervalo donde $r > r_2$ es:

$$\frac{\partial P}{\partial r} = \frac{\rho}{r} \psi - \frac{\rho r f^2}{4} \quad (19)$$

donde:

$$\psi = \left\{ V_{max} \left[(1 - A) e^{-\frac{(r-r_m)}{x_1}} \right] + A e^{-\frac{(r-r_m)}{x_2}} + \frac{fr}{2} \right\}^2 \quad (20)$$

II.2. Casos de estudio

Como casos de estudio para evaluar el comportamiento del modelo HuMPI se seleccionaron los huracanes Matthew (2016), Maria (2017) y Michael (2018), formados en la cuenca del océano Atlántico Norte. El criterio de selección de estos sistemas estuvo basado en la intensidad alcanzada durante su evolución. La información de la intensidad y la posición de los casos de estudio se extrajo de la base de datos HURDAT2 [33] del Centro Nacional de Huracanes de los Estados Unidos (NHC, por sus siglas en inglés). La misma está disponible en <https://www.nhc.noaa.gov/data/#hurdat>. En todos los casos, los experimentos se realizaron cuando CT alcanzó la categoría de tormenta tropical.

Los datos de la temperatura superficial del mar (TSM) fueron extraídos de la base de datos OISST (Optimum Interpolation Sea Surface Temperature) del Centro de Datos Climáticos de los Estados Unidos (NCDC, por sus siglas en inglés). Esta base de datos de TSM es un análisis construido combinando observaciones de diferentes plataformas (satélites, barcos, boyas, entre otros) mediante el uso de una malla global regular de $0,25^\circ$ de resolución horizontal. La metodología usada incluye el ajuste de sesgo de las observaciones de satélites y barcos para compensar las diferencias de plataforma y los sesgos de los sensores [34].

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

III.1. Huracán Matthew

El huracán Matthew se formó a finales de septiembre de 2016, a partir de una onda tropical proveniente de las costas de África con rápido movimiento hacia el oeste. Al pasar al norte la isla de Barbados, el entonces disturbio tropical mostró signos de organización caracterizados por fuerte actividad eléctrica y convectiva, por lo que se convirtió en tormenta tropical.

A pesar de una moderada cizalladura vertical del viento de 30-40 km/h, Matthew experimentó un proceso de rápida intensificación, desde el 30 de septiembre a las 0000 UTC al 1 de octubre a las 0000 UTC alcanzando la categoría 5 en la escala Saffir-Simpson, con un aumento de la velocidad del viento en 140 km/h para alcanzar una máxima intensidad de 275 km/h

de velocidad máxima del viento y una presión mínima central de 942 hPa.

Durante su trayectoria, Matthew se trasladó sobre las cálidas aguas del Mar Caribe Oriental con temperaturas entre los 29 y 30 °C, como se muestra en la figura 1, encontrando una moderada cizalladura vertical del viento en los niveles medios y altos, lo que favoreció el mantenimiento de la circulación secundaria del sistema mediante el suministro de suficiente vapor de agua para la intensificación de la convección profunda [35].

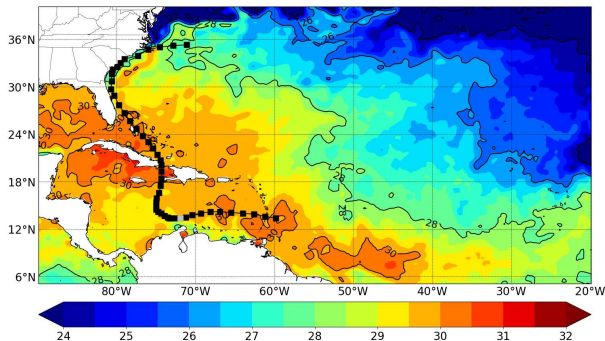


Figura 1. Huracán Matthew. Temperatura superficial del mar obtenida de la base de datos OISST. El punto señalado en color plateado corresponde a la posición donde el CT alcanzó la máxima intensificación.

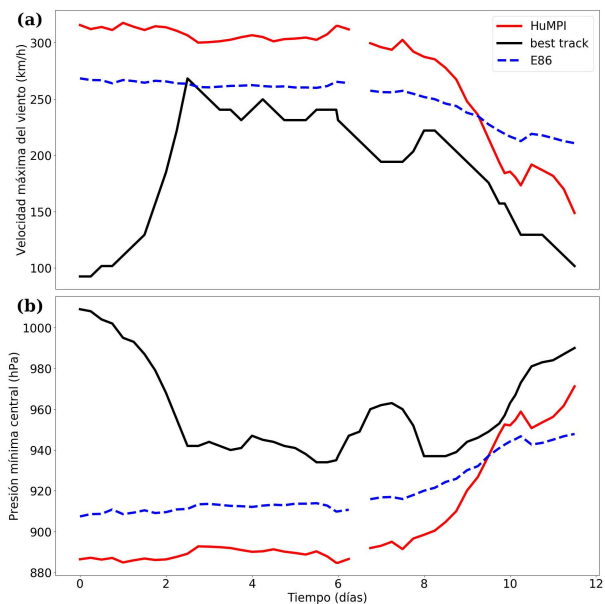


Figura 2. Huracán Matthew. Comparación entre la intensidad máxima potencial (IMP) y la intensidad real para la (a) Velocidad máxima del viento (km/h) y (b) Presión mínima central (hPa). La curva discontinua en azul representa la IMP calculada por el modelo de Emanuel [12] (E86). La discontinuidad en las curvas roja y azul se corresponde con el centro del huracán cruzando sobre tierra, donde no se calcula la IMP.

En la figura 2 se muestra la evolución temporal de la intensidad observada a lo largo de la trayectoria y la intensidad potencial durante la vida del huracán Matthew. En las simulaciones realizadas con el modelo HuMPI se observa que la IMP calculada para Matthew osciló alrededor de los 300 km/h en la velocidad del viento y los 890 hPa para la presión mínima central durante la etapa de intensificación del sistema. Adicionalmente, en la figura 2 se observa que la estimación de

la IMP utilizando el modelo de Emanuel [12] es ligeramente inferior a la IMP estimada con HuMPI. Incluso, la intensidad máxima alcanzada por el huracán Matthew es superior en 15 km/h a la IMP estimada con el modelo de Emanuel [12].

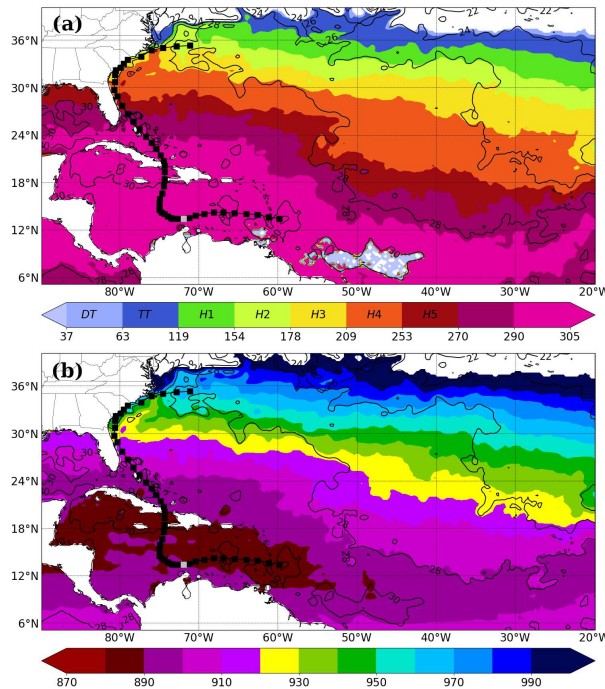


Figura 3. Huracán Matthew. Simulación del modelo HuMPI para la (a) Velocidad máxima del viento (km/h) y la (b) Presión mínima central (hPa). Se ha planteado la trayectoria real seguida por el CT, el punto destacado en la trayectoria corresponde al área en la que alcanzó el pico de máxima intensificación.

Por otro lado, la figura 3 muestra la trayectoria de Matthew y los campos de velocidad máxima potencial y presión mínima central potencial estimados con el modelo HuMPI. El movimiento de Matthew entre la región oriental de Cuba y la Isla de La Española, provocó que disminuyera su intensidad debido a la pérdida de energía por la fricción generada en su interacción con tierra, fundamentalmente con las elevaciones de ambas islas. Posteriormente, experimentó un debilitamiento por causa similar al cruzar sobre el archipiélago de las Bahamas.

Adicionalmente, como se observa en la figura 2, después del 7^{mo} día de evolución, ocurre una convergencia entre la IMP y la intensidad real, lo cual es un indicativo de un debilitamiento, debido al movimiento del CT muy próximo a la costa o sobre aguas más frías. El comportamiento anterior se puede apreciar en la figura 3, donde es evidente la trayectoria de Matthew bordeando la costa este de los Estados Unidos.

Por otro lado, en la figura 3 se observa que en la zona donde el huracán alcanzó el pico de máxima intensidad (punto gris) se corresponde con un área donde la temperatura superficial del mar fue máxima (ver figura 1), y las simulaciones, tanto para la velocidad máxima potencial del viento como para la presión mínima potencial evidenciaron altos valores de intensidad, la que pudo haber alcanzado el sistema si hubiese encontrado todas las condiciones ambientales favorables para su intensificación. De forma general, el Huracán Matthew

alcanzó el 91.6 % de la intensidad máxima potencial estimada con el modelo HuMPI.

III.2. Huracán María

Según Pasch [36], el huracán María se originó de una onda tropical bien definida proveniente de la costa oeste de África. Con un movimiento hacia el oeste, por el sur de un área de alta presión en los niveles medios, el entonces disturbio tropical se convirtió en una tormenta tropical alrededor de las 1800 UTC del 16 de septiembre y apenas 24 horas después alcanzaba la categoría de huracán con vientos superiores a las 120 km/h. Su movimiento sobre aguas oceánicas muy cálidas con temperaturas oscilando alrededor de los 30 °C, como se muestra en la figura 4, y una débil cizalladura vertical del viento, el huracán experimentó una intensificación rápida, variando en 80 km/h la velocidad máxima del viento en tan solo 12 horas.

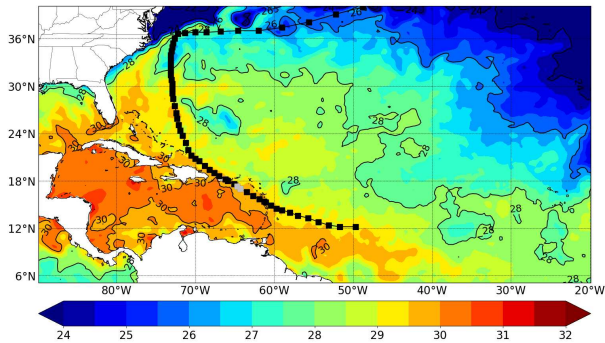


Figura 4. Huracán María. Temperatura superficial del mar obtenida de la base de datos OISST. El punto señalado en color plateado corresponde a la posición donde el CT alcanzó la máxima intensificación.

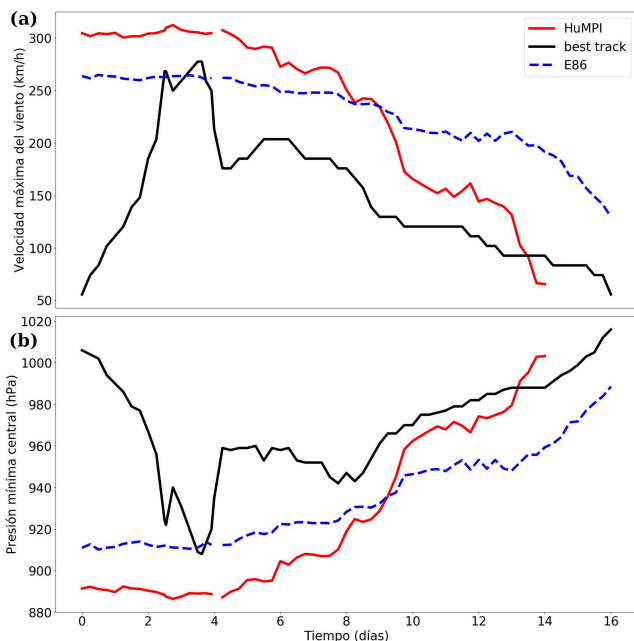


Figura 5. Huracán María. Comparación entre la intensidad máxima potencial (IMP) y la intensidad real para la (a) Velocidad máxima del viento (km/h) y (b) Presión mínima central (hPa). La curva discontinua en azul representa la IMP calculada por el modelo de Emanuel [12] (E86). La discontinuidad en las curvas roja y azul se corresponde con el centro del huracán cruzando sobre tierra, donde no se calcula la IMP.

Después de tocar tierra en la isla de Dominica, María continuó moviéndose hacia el oeste noroeste sobre aguas muy cálidas, experimentando nuevamente otro proceso de intensificación hasta alcanzar 280 km/h de velocidad máxima del viento y 908 hPa de presión mínima central. En la figura 5 se observa la evolución temporal del proceso de intensificación y debilitamiento experimentados por María. A medida que el sistema fue ganando en organización e intensidad fue aproximándose a los 298 km/h simulados por HuMPI para la velocidad máxima potencial del viento y a los 895 hPa para la presión mínima potencial.

Similar al comportamiento observado para el huracán Matthew, la IMP estimada para María mediante el modelo original de Emanuel [12] (curva azul en la figura 5) fue de 263 km/h, 20 km/h inferior a la velocidad máxima observada, mientras que la presión mínima potencial fue solo 3 hPa superior a la presión mínima central registrada en la base de datos HURDAT2 para este huracán.

Después del pico de máxima intensidad (ver figura 5) se observa una convergencia entre ambas curvas, lo cual evidencia el movimiento del sistema sobre aguas oceánicas más frías. Es notable, que entre los 13 y 16 días de evolución, la intensidad real es superior a la intensidad potencial simulada. Lo anterior no tienen ninguna importancia práctica, pues la intensidad experimentada por el sistema es inferior a los 100 km/h. Como se había explicado anteriormente, el modelo HuMPI depende de la temperatura superficial del mar, y para estos días, María se desplazaba por aguas oceánicas con temperaturas inferiores a los 24 °C, como se muestra en la figura 4.

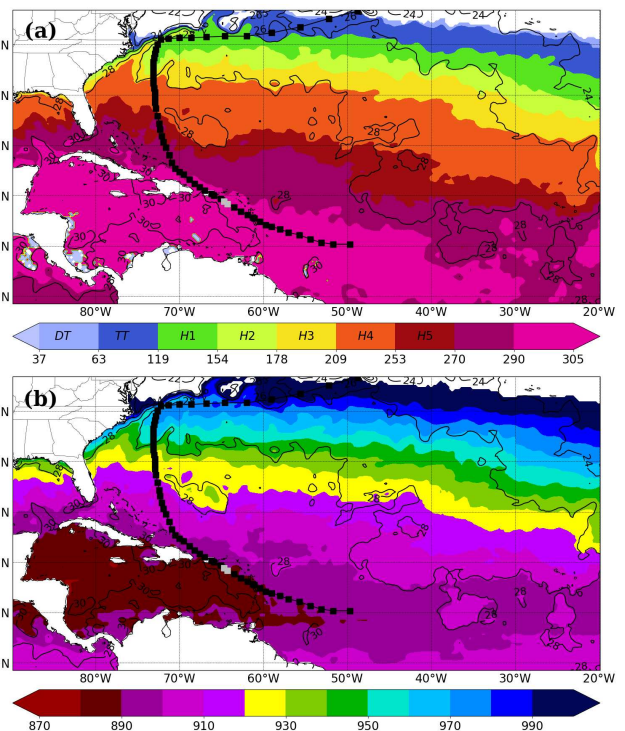


Figura 6. Huracán María. Simulación del modelo HuMPI para la (a) Velocidad máxima del viento (km/h) y la (b) Presión mínima central (hPa). Se ha planteado la trayectoria real seguida por el CT, el punto destacado en la trayectoria corresponde al área en la que alcanzó el pico de máxima intensificación.

Adicionalmente, en la figura 6 se muestra la IMP simulada para María y la trayectoria descrita por el CT, donde se observa que el sistema alcanzó la máxima intensidad en las zonas estimadas por el cálculo de la intensidad potencial, las cuales coinciden con áreas donde la temperatura superficial del mar fue superior a los 29-30 °C (ver figura 4).

Debido a que el Huracán María se desplazó generalmente sobre aguas oceánicas cálidas interactuando poco con tierra, así como las condiciones ambientales favorables, posibilitaron que la intensidad real experimentada fuera el 93.9 % de la IMP.

III.3. Hurricane Michael

El huracán Michael tuvo un origen complicado y un prolongado proceso de génesis en el Golfo de Honduras. Después de su formación como depresión tropical, y a pesar de una moderada a fuerte cizalladura del viento del suroeste debido a una vaguada en niveles medios sobre el Golfo de México, Michael experimentó un proceso de rápida intensificación, convirtiéndose en tormenta tropical 6 horas después de su formación. Un día después, alcanzó la categoría de huracán, alrededor del 8 de octubre a las 1200 UTC [37]. El rompimiento de la estructura convectiva de la pared del ojo provocó un ligero debilitamiento de Michael cuando este se internó en el Golfo de México, sin embargo, 12 horas después reiniciaba su proceso de intensificación hasta alcanzar una velocidad máxima del viento de 260 km/h y una presión mínima central de 919 hPa, unas horas antes de tocar tierra en cerca de la Base de la Fuerza Aérea de Tyndall, en Florida [37].

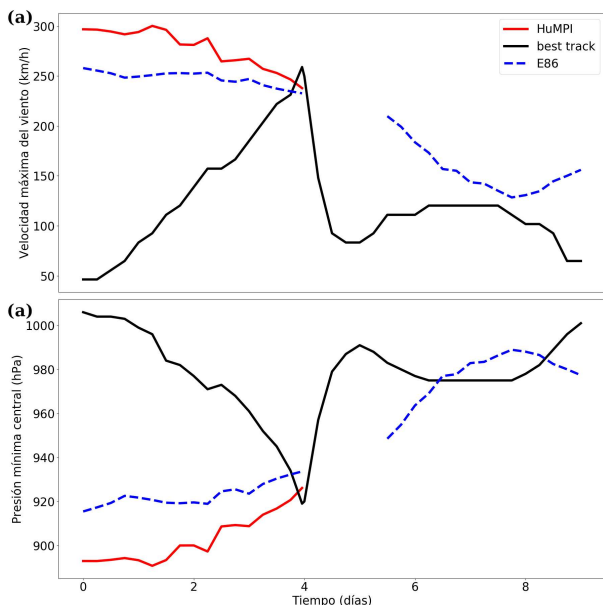


Figura 7. Huracán Michael. Comparación entre la intensidad máxima potencial (IMP) y la intensidad real para la (a) Velocidad máxima del viento (km/h) y (b) Presión mínima central (hPa). La curva discontinua en azul representa la IMP calculada por el modelo de Emanuel [12] (E86). La discontinuidad en las curvas roja y azul se corresponde con el centro del huracán cruzando sobre tierra, donde no se calcula la IMP.

En la figura 7 se observa la evolución temporal de los procesos de intensificación y debilitamiento experimentado por Michael. Es notable que después del 4^{to} día de evolución,

la curva de la intensidad máxima potencial se interrumpe inicialmente debido al desplazamiento del sistema sobre tierra, donde la IMP por definición es nula, sin embargo, después de los 5.5 días, la IMP estimada por el modelo de Emanuel [12] alcanza nuevamente valores, mientras que la IMP estimada por HuMPI aparece indeterminada. La temperatura superficial del mar por las regiones donde se desplazó Michael una vez que salió nuevamente al mar fue inferior a los 24 °C (ver figura 8a), lo que sugiere que el modelo HuMPI tiene limitaciones para estimar la IMP cuando la TSM es ligeramente fría.

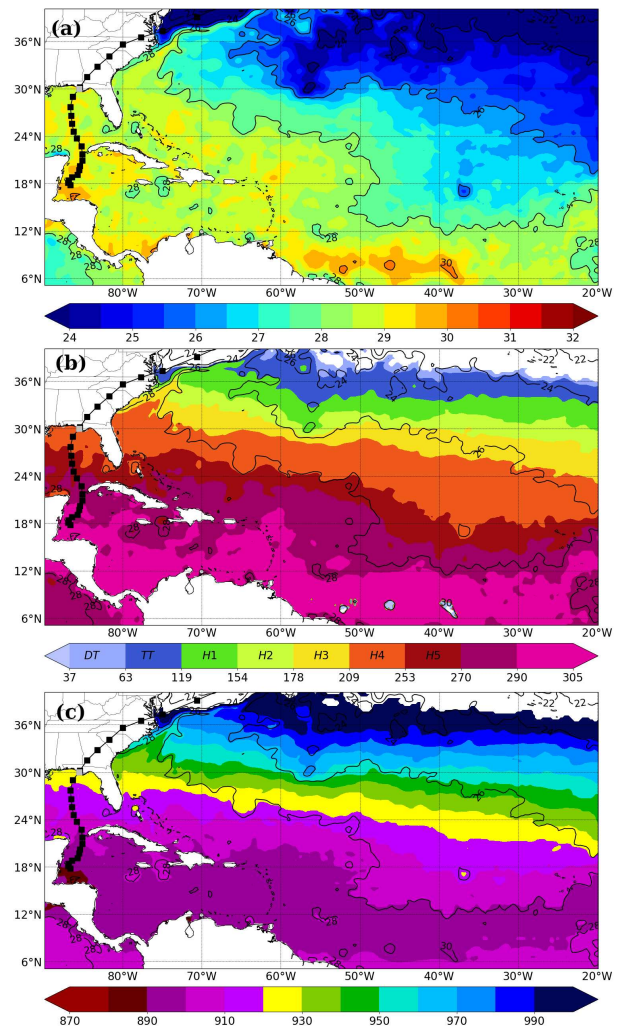


Figura 8. Huracán Michael. Simulación del modelo HuMPI para la (a) Velocidad máxima del viento (km/h) y la (b) Presión mínima central (hPa). Se ha planteado la trayectoria real seguida por el CT, el punto destacado en la trayectoria corresponde al área en la que alcanzó el pico de máxima intensificación.

Por otro lado, es apreciable que la intensidad real alcanzada por Michael fue superior a la IMP simulada, tanto por HuMPI como por el modelo de Emanuel [12]. El comportamiento anterior para HuMPI se atribuye a que el modelo incorpora un algoritmo de reducción de la intensidad potencial cuando el sistema se encuentra cercano a la costa, debido a que la interacción de la circulación del CT con tierra induce un debilitamiento, como se ha observado en los casos anteriores.

Para Michael, la IMP simulada fue de 250 km/h para la

velocidad del viento y 921 hPa para la presión mínima central. Aunque estos valores son inferiores a la intensidad real, la diferencia es despreciable, por lo que, bajo las condiciones descritas previamente, la simulación de la IMP por el modelo HuMPI para este sistema puede catalogarse de favorable.

En la figura 8 se muestran los campos de temperatura superficial del mar, velocidad máxima potencial del viento, presión mínima potencial y la trayectoria descrita por el huracán Michael. Como se observa, en el Golfo de México el CT encontró aguas ligeramente cálidas con temperaturas superiores a los 28 °C, como se muestra en la figura 8a, condición que favoreció el proceso de intensificación continua que experimentó mientras se dirigía hacia la costa sur de los Estados Unidos. Es importante resaltar, que en el Golfo de México, la IMP simulada osciló entre los 900 y 910 hPa en el caso de la presión mínima central y entre 250 y 270 km/h en la velocidad máxima del viento, lo cual puede considerarse como una buena aproximación de la intensidad real alcanzada por Michael.

III.4. Algunas consideraciones

En los casos de estudio analizados, se observó que los CTs alcanzaron una intensidad cercana al 92 % de la intensidad máxima potencial simulada por el modelo HuMPI, con excepción de los cálculos realizados para el huracán Michael, donde su intensidad real excedió ligeramente a la IMP. Por otro lado, fue evidente la estrecha relación que existe entre la IMP y la temperatura superficial del mar, lo cual permite estimar con buena aproximación la máxima intensidad que puede alcanzar un ciclón tropical si se combinan todas las condiciones dinámicas y termodinámicas para su intensificación y desarrollo. Tanto para el huracán Matthew como para María se observa la convergencia de las curvas de la intensidad máxima potencial y la intensidad real después que el sistema alcanzó el pico de máxima intensidad, lo cual está en correspondencia con los resultados previos de Pérez-Alarcón [16] y Fernández-Alvarez et al. [18].

En todos los casos, se observó además que la IMP estimada usando el modelo de Emanuel [12] fue inferior a la intensidad real alcanzada por los tres huracanes. Este comportamiento fue demostrado por Persing y Montgomery [38], cuando señalaron que modelos numéricos de alta resolución tienden a producir tormentas “superintensas”, es decir, tormentas que exceden significativamente la intensidad predicha por la teoría de Emanuel [12]. Según estos autores, la causa de la superintensidad radica en la presencia de aire con altos valores de entropía procedente del ojo del huracán y que penetra en los niveles bajos de la pared del ojo, haciendo un aporte adicional de calor, lo que conduce al establecimiento de un ciclo modificado de Carnot capaz de crear sistemas más intensos. Esto ha sido confirmado por la evidencia observacional, ademas, Smith et al. [39] plantearon que la inconsistencia fundamental del modelo de Emanuel [12], es la suposición de un balance de viento gradiente en la capa límite, tanto dentro como fuera del radio de vientos máximos. Según Smith et al. [39], la capa límite de un CT debe su existencia al

desequilibrio del viento gradiente. En el modelo HuMPI estas problemáticas están resueltas, pues se estima la velocidad máxima potencial a partir del desequilibrio termodinámico en el tope de la capa fronteriza y posteriormente se calcula la velocidad máxima potencial en superficie a partir de la incorporación del modelo de ciclón tropical en la capa fronteriza atmosférica, como se detalló en la descripción del modelo.

Por otro lado, el modelo HuMPI se encuentra actualmente operativo en el Departamento de Meteorología del Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), de la Universidad de La Habana, Cuba, y sus salidas pueden consultarse diariamente en <https://www.instec.cu/model/HuMPI.php>. Igualmente, las simulaciones diarias de HuMPI pueden contrastarse con las simulaciones diarias realizadas con el modelo de Emanuel [12], las cuales se encuentran disponibles en <http://wxmaps.org/pix/hurpot/>.

Además, el modelo HuMPI puede aplicarse a estudios de vulnerabilidad y riesgo en zonas costeras para conocer la cota máxima de marea de tormenta que pudiera afectar el área en presencia de un CT. Para ello podría usarse algún modelo de marea de tormenta con el campo de viento obtenido a partir de un modelo paramétrico de CT usando como velocidad máxima y presión mínima central la IMP simuladas.

IV. CONCLUSIONES

Se comprobó el desempeño del modelo de intensidad potencial de huracanes HuMPI al incorporarle el perfil de presión desarrollado por Alvarez et al. [18] obtenido a partir del perfil radial del viento de Willoughby et al. [17], garantizando una relación física directa entre la presión mínima central y la velocidad máxima del viento en superficie.

La localización espacial del área donde los CTs alcanzaron la máxima intensidad coincide con las zonas de mayor temperatura superficial del mar por donde se desplazaron los huracanes y con las áreas de máxima intensidad potencial estimadas. El caso del huracán Michael, al alcanzar su máxima intensidad muy próximo a la costa, evidenció las incertidumbres existentes en los mecanismos físicos que controlan la intensificación de los ciclones tropicales y las limitaciones de HuMPI para estimar la IMP cuando la temperatura superficial del mar es ligeramente fría.

Por otro lado, los resultados obtenidos, permiten emplear el modelo HuMPI en análisis de riesgo sobre el impacto del calentamiento global en la intensidad de los ciclones tropicales, así como de la ocurrencia de marea de tormenta ante la presencia de huracanes muy intensos en la cercanía de las áreas costeras. Adicionalmente, el modelo HuMPI puede emplearse para investigar la relación entre las intensidades máximas observadas de los CTs y la IMP durante el ciclo estacional, teniendo en cuenta la variabilidad mes a mes de las trayectorias y frecuencias de los CTs.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Centro Nacional de Huracanes la disponibilidad de la base de datos HURDAT2 y al Centro de Datos Climáticos la base de datos de temperatura superficial del mar OISST.

REFERENCIAS

- [1] K. Ankur, N. K. R. Busireddy, K. K. Osuri, D. Niyogi, *Int. J. Climatol.* **40**, 2015 (2020).
- [2] T. Knutson, J. McBride, J. Chan, K. Emanuel, G. Holland, C. Landsea, I. Held, J. Kossin, K. Srivastava, M. Sugi, *Nat. Geosci.* **3**, 157 (2010).
- [3] M. DeMaria and J. Kaplan, *Weather and Forecasting* **14**, 326 (1999).
- [4] F. Zhang, Y. Weng, J. F. Gamache, F. D. Marks, *Geophys. Res. Lett.* **38**, (2011).
- [5] C. Cacciamani, D. Cesari, F. Grazzini, T. Paccagnella, M. Pantone, *Meteorol. Atmos. Phys.* **72**, 147 (2000).
- [6] K. Singh, M. Mandal, Impact of Initial and Boundary Conditions on Mesoscale Simulation of Bay of Bengal Cyclones Using WRF-ARW Model, In: Ray K., Mohapatra M., Bandyopadhyay B., Rathore L. (eds) *High-Impact Weather Events over the SAARC Region*. Springer, Cham (2015).
- [7] Y. Wang and C.-C. Wu, *Meteorol. Atmos. Phys.* **87**, 257(2004).
- [8] E. Kleinschmidt, *Archiv für Meteorologie, Geophysik und Bioklimatologie, Serie A* **4**, 53 (1951).
- [9] B. I. Miller, *J. Meteorol.* **15**, 184 (1958).
- [10] J. S. Malkus, H. Riehl, *Tellus* **12**, 1 (1960).
- [11] J. Camp, M. Montgomery, *Mon. Weather Rev.* **29**, 1704 (2001).
- [12] K. A. Emanuel, *J. Atmos. Sci.* **43**, 585 (1986).
- [13] S. Garner, *J. Atmos. Sci.* **72**, 141 (2015).
- [14] C. Q. Kieu, Z. Moon, *Bull. Am. Meteorol. Soc.* **97**, 1847 (2016).
- [15] A. M. Kowaleski, J. L. Evans, *Mon. Weather Rev.* **144**, 3569 (2016).
- [16] A. Pérez-Alarcón, Diploma Thesis Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Havana, July, 2015.
- [17] H. E. Willoughby, R. W. R. Darling, M. Rahn, *Mon. Weather Rev.* **134**, 1102 (2006).
- [18] J. C. Fernández-Alvarez, O. D. Rodríguez, A. Pérez-Alarcón, *Rev. Bras. Met.* **34**, 101 (2019).
- [19] S. Wang, S. J. Camargo, A. H. Sobel, L. M. Polvani, *J. Atmosph. Sci.* **71**, 4333 (2014).
- [20] A. A. Wing, K. Emanuel and S. Solomon, *Geophys. Res. Lett.* **42**, 8669 (2015).
- [21] D. M. Gilford, S. Solomon and K. A. Emanuel, *J. Clim.* **30**, 6085 (2017).
- [22] K. A. Emanuel, Tropical cyclone energetics and structure. *Atmospheric Turbulence and Mesoscale Meteorology*, E. Federovich, R. Rotunno, and B. Stevens, Eds. (Cambridge University Press, United Kingdom, 2004).
- [23] R. K. Smith, *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **129**, 1007 (2003).
- [24] M. S. Peng, B.-F. Jeng and R. Williams, *J. Atmos. Sci.* **56**, 1404 (1999).
- [25] G. J. Holland, *Mon. Weather Rev.* **1008**, 1212 (1980).
- [26] M. DeMaria, *Mon. Weather Rev.* **115**, 2346 (1987).
- [27] T. Frisius, D. Scgonemann, *J. Atmos. Sci.* **70**, 1874 (2013).
- [28] V. T. Wood, *et al.*, *Mon. Weather Rev.* **141**, 1884 (2013).
- [29] J. Kepert, Y. Wang, *J. Atmos. Sci.* **58**, 2485 (2001).
- [30] H. A. Ramsay, L. M. Leslie, J. D. Kepert, *Mon. Weather Rev.* **137**, 4171 (2009).
- [31] J. D. Kepert, *J. Atmos. Sci.* **63**, 2194 (2006).
- [32] J. Schwendike, J. D. Kepert, *Mon. Weather Rev.* **136**, 3168 (2008).
- [33] C. W. Landsea, J. L. Franklin, *Mon. Weather Rev.* **141**, 3576 (2013).
- [34] V. F. Banzon, R. W. Reynolds, D. Stokes and Y. Xue, *J. Clim.* **27**, 8221 (2014).
- [35] S. S. R., National Hurricane Center Tropical Cyclone Report. Hurricane Matthew (AL142016), Technical report, NOAA/National Hurricane Center (2017). URL <https://www.nhc.noaa.gov/data/tcr/AL142016Matthew.pdf>.
- [36] R. J. Pasch, A. B. Penny, R. Berg, National Hurricane Center Tropical Cyclone Report. Hurricane Maria (AL152017), Technical report, 9 NOAA/National Hurricane Center (2019). URL <https://www.nhc.noaa.gov/data/tcr/AL152017Maria.pdf>.
- [37] J. L. B. II, R. Berg and A. Hagen, National Hurricane Center Tropical Cyclone Report. Hurricane Michael (AL142018), Technical report, NOAA/National Hurricane Center (2019). URL <https://www.nhc.noaa.gov/data/tcr/AL142018Michael.pdf>.
- [38] J. Persing and M. T. Montgomery, *J. Atmosph. Sci.* **60**, 2349 (2003).
- [39] R. K. Smith, M. T. Montgomery and S. Vogl, *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **134**, 551 (2008).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



ELECTRON CORRELATION EFFECTS AND DIPOLAR/OCTUPOLAR CONTRIBUTION ON THE FIRST HYPERPOLARIZABILITY OF PUSH-PULL OLIGOMER SYSTEMS

EFFECTOS DE CORRELACIÓN ELECTRÓNICA Y CONTRIBUCIÓN DIPOLAR / OCTUPOLAR EN LA PRIMERA HIPERPOLARIZABILIDAD DE SISTEMAS PUSH-PULL OLIGÓMEROS

N. S. LABIDI[†]

Department of Matter Sciences, Institute of Sciences and Technology, University center of Tamanghasset 11000, Algeria; labidi19722004@yahoo.fr[†]

[†] autor para la correspondencia

Recibido 25/7/2021; Aceptado 25/10/2021

The hyper-Rayleigh scattering first hyperpolarizabilities β_{HRS} of a series of push-pull oligomer are studied using theoretical chemistry methods. Several DFT XC functionals have been used while reliable atomic basis sets have been selected for their evaluations. The behavior of hyper-Rayleigh scattering first hyperpolarizability is studied as a function of the basis sets, of electron correlation, of solvent as well as the strength of the electron donor groups to address structure-property relationships. It has been observed that the electron correlation effects are huge, the Moller–Plesset results reproduces the values of the first hyperpolarizability obtained with the reference CCSD(T) level. Among density functional theory exchange-correlation functionals, B3LYP, M062X and CAM-B3LYP are reliable to the MP2 for characterizing the static and dynamic first hyperpolarizability. Finally, the EFISHG first hyperpolarizabilities values put on view different ordering and present more delicate variations as a function of the substituted oligomers. The depolarization ratios follow an opposite ordering as the anisotropy factors while they display an extensive separation dipolar-octupolar character.

Las primeras hiperpolarizabilidades de dispersión hiper-Rayleigh β_{HRS} de una serie de oligómeros push-pull se estudian utilizando métodos de química teórica. Se han utilizado varias funciones DFT XC, mientras que se han seleccionado conjuntos de bases atómicas fiables para sus evaluaciones. La primera hiperpolarizabilidad β_{HRS} se estudia en función de los conjuntos de bases, de correlación de electrones, del disolvente, así como de la fuerza de los grupos donantes de electrones para abordar las relaciones estructura-propiedad. Se ha observado que los efectos de correlación electrónica son enormes, los resultados de Moller-Plesset reproducen los valores de la primera hiperpolarizabilidad obtenidos con el nivel de referencia CCSD (T). Entre las funciones de intercambio-correlación de la teoría funcional de densidad, B3LYP, M062X y CAM-B3LYP son fiables para la primera hiperpolarizabilidad estática y dinámica. Finalmente, los primeros valores de hiperpolarizabilidades de EFISHG ponen a la vista diferentes ordenamientos y presentan variaciones más delicadas en función de los oligómeros sustituidos. Las relaciones de despolarización siguen un orden opuesto al de los factores de anisotropía, mientras que muestran un carácter de separación dipolar-octupolar extenso.

PACS: Density-functional theory condensed matter (teoría de funcional de densidad en materia condensada), 71.15.Mb; Rayleigh scattering in condensed matter (dispersión de Rayleigh en materia condensada), 78.35.+c

I. INTRODUCTION

Second-order nonlinear optical organic materials are interesting due to their high potential in photonic applications such as active wavelength filters, optical switches, modulators and for THz wave generation [1–3]. For high-speed second-order nonlinear optical (NLO) applications, such as electro optics (EO), second-harmonic generation (SHG), optical parametric oscillation (OPO), and optical rectification (OR), including terahertz (THz) wave generation, a highly asymmetric electronic response of the material to the external electric field is required [4].

The level of SHG response of a given material is intrinsically dependent upon its structural attributes. On a molecular scale, the extent of charge transfer (CT) across the NLO chromophore determines the level of SHG output; the greater the CT, the larger the SHG output [1–5]. The search for larger first hyperpolarizabilities combines the selection of a bridge and the better donor/acceptor substituted groups,

which maximises the nonlinear optical response of materials. Consequently, a number of quantum mechanical studies have been devoted to predict these properties. First and second Hyperpolarizabilities have been evaluated with several methods, i.e., HF, DFT, MP2, MP4, CCSD, and CCSD(T), using the 6-31G(d), 6-31G+(d), and 6-311+G(d), aug-cc-pVDZ and aug-cc-pVTZ basis sets [6]– [12]. The SOS method was used for calculation of static and dynamic hyper polarizabilities at Time-dependent Hartree-Fock (TDHF) and Time-dependent density functional (TDDFT) levels [13].

After many years of investigations, there is a need to reconsider some basic concepts using density functional DFT methods. So, further refinement and better basis sets are still needed to obtain more qualitative and quantitative results.

In this study, density functional method was applied to predict and analyze the first hyperpolarizability β_{HRS} of push-pull oligomer [D- π -NO₂]. This is achieved by performing quantum chemical calculations at different levels

of approximation and discussing the relative performance of different methods for assessment of MP2 and DFT schemes with respect to CCSD(T) method. In addition, we address for a series of all-trans oligomer $\text{NO}_2\text{-(CH=CH)}_3\text{-D}$, the substitution effects on the first hyperpolarizabilities (β_{HRS}) that can be measured using the electric field induced second harmonic generation (EFISHG) technique. Also, we discuss the theoretical separation of the octupolar and dipolar contributions to the HRS first hyperpolarizability.

II. COMPUTATIONAL DETAILS

The geometries were fully optimized in vacuum and in acetonitrile solvent at the density functional theory (DFT) level using the B3LYP exchange–correlation functional and the 6-311G* basis set.

The dynamic $\beta_{\text{HRS}}(-2\omega, \omega, \omega)$ and static $\beta_{\text{HRS}}(0; 0, 0)$ first hyperpolarizabilities were evaluated with different schemes. Firstly, at the time-dependent Hartree-Fock (TDHF) [14], coupled perturbed Hartree-Fock (CPHF) and secondly at the time-dependent density functional theory (TDDFT) [15]. To take into account the solvent effects, the polarizable continuum model within the integral equation formalism (IEF-PCM) [16] was used.

The TDDFT calculations were carried out using the common wavelength (λ) of 1064 nm. Only some DFT XC functionals were selected to calculate β : the B3LYP [17], M05-2X and M05 [18], LC-BLYP [19], CAM-B3LYP [20], M062X [21], BHHLYP [22] and B3P86 [23]. The LC XC functionals have been shown to correct conventional DFT schemes for their short-sighted drawbacks [24].

Champagne and co-workers [25] developed an effective method to evaluate the hyper-Rayleigh scattering (HRS) response $\beta(-2\omega; \omega, \omega)$, which is described as:

$$\beta_{\text{HRS}}(-2\omega, \omega, \omega) = \sqrt{\langle \beta_{\text{ZZZ}}^2 \rangle + \langle \beta_{\text{ZXX}}^2 \rangle} \quad (1)$$

$\langle \beta_{\text{ZZZ}}^2 \rangle$ and $\langle \beta_{\text{ZXX}}^2 \rangle$ are the orientational averages of the molecular β tensor components.

The molecular geometric information is given by the depolarization ratio (DR), which is expressed by:

$$\text{DR} = \frac{\langle \beta_{\text{ZZZ}}^2 \rangle}{\langle \beta_{\text{ZXX}}^2 \rangle} \quad (2)$$

The amplitude of DR depends on the angle between the chromophores as well as the strengths of the Donnor/Acceptor groups. For an ideal system within substituted Donnor/Acceptor groups the $\text{DR} = 5$ [24, 25].

On the other hand, the central quantity $\beta_{\parallel}(-2\omega; \omega, \omega)$ corresponds to the projection of the vector part of β on the dipole moment vector:

$$\beta_{\parallel} = \frac{3}{5} \sum \frac{\mu_i \beta_i}{\|\mu\|} \quad (3)$$

where $\|\mu\|$ is the norm of the dipole moment and μ_i and β_i are the components of the μ and β vectors.

The relative contribution of the octupolar and dipolar components is given by the nonlinear anisotropy ratio:

$$\rho = \frac{|\beta_{J=3}|}{\beta_{J=1}} \quad (4)$$

where $\beta_{J=1}$ and $\beta_{J=3}$ are the dipolar and octupolar contributions of the β response.

Then, the nonlinear anisotropy parameter ρ is employed to evaluate the ratio of the octupolar [$\Phi_{\beta_{J=3}} = \rho/(1 + \rho)$] and dipolar [$\Phi_{\beta_{J=1}} = 1/(1 + \rho)$] contribution to the hyperpolarizability tensor.

To account for frequency dispersion at the Møller-Plesset (MP2) level, we employed the multiplicative approximation, which consists of multiplying the static MP2 value by the ratio between the TDHF and CPHF values. In the case of β this expression reads:

$$\beta_{\text{MP2}}(-2\omega; \omega, \omega) = \beta_{\text{MP2}}(0; 0, 0) \times \frac{\beta_{\text{TDHF}}}{\beta_{\text{CPHF}}} \quad (5)$$

This approximation, which assumes that frequency dispersion is the same at both the HF and correlated MP2 levels, has been shown to be a satisfactory approximation for different systems [27]. All reported β values are given in a.u. [1 a.u. of $\beta = 3,6213 \times 10^{-42} \text{ m}^4\text{V}^{-1} = 3,2064 \times 10^{-53} \text{ C}^3\text{m}^3\text{J}^{-2} = 8,639 \times 10^{-33} \text{ esu}$] within the T convention [5]. All calculations were performed using the Gaussian 09 program [28].

III. RESULTS AND DISCUSSION

III.1. Optimized geometry

The principal geometrical parameters of the all trans α, ω -nitro, dimethylamino-hexatriene are displayed in figure 1 and presented in Table S1 (Supporting information). The B3LYP/6-311G* optimized geometry shows a planar structure, the calculated dihedral angles are $\theta_{\text{N8C7C6C5}} = 180^\circ$, $\theta_{\text{C2C3C4C5}} = 180^\circ$ and $\theta_{\text{C7C6C5C4}} = 180^\circ$. In addition, the bond lengths of the C=C bonds are not the same. The middle $\text{C}_4=\text{C}_5$ bond has a length of 1,363 Å while the $\text{C}_2=\text{C}_3$ and $\text{C}_6=\text{C}_7$ bonds at the ends of the molecule have lengths of 1,366 Å and 1,349 Å, the $\text{C}_2=\text{C}_3$ bond in close proximity to the substituted alkylamine group $-\text{N}(\text{Me})_2$ is more longer. The C–N bonds elongate, the $\text{C}_2-\text{N}(\text{Me})_2$ bond is shorter 1,358 Å than the C_7-NO_2 bond close to 1,493 Å. The carbon-carbon single bonds C_3-C_4 and C_5-C_6 are reduced to 1,43 Å long, also off from the standard 1,54 Å length of carbon-carbon single bonds. However, the difference between the bond lengths of the $\text{C}_4=\text{C}_5/\text{C}_3-\text{C}_4$ and $\text{C}_4=\text{C}_5/\text{C}_5-\text{C}_6$ bonds in the middle leads to an average bond length alternation (BLA) for the π -conjugate bridge about 0,063 Å. Moreover, an increase of 0,014 Å in bond-length alternation takes place from the middle to the end of the acceptor-side- NO_2 , the BLA between the $\text{C}_6=\text{C}_7$ and $\text{C}_5-\text{C}_6 = 0,077$ Å. However, on the donor-side $-\text{N}(\text{Me})_2$ the BLA between the $\text{C}_2=\text{C}_3$ and C_3-C_4 is close to 0,059 Å and a

decrease of $-0,004 \text{ \AA}$ in bond-length alternation is observed.

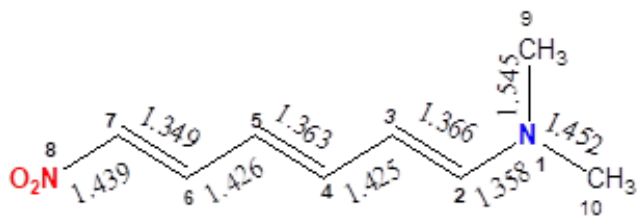


Figure 1. B3LYP/6-311G* optimized structure for the all trans α,ω -nitro, dimethylamino-hexatriene with the principal interatomic distances (\AA).

III.2. Basis sets effects

The choice of atomic orbital basis set for determining the static and dynamic HRS first hyperpolarizabilities was addressed by considering the trans α,ω -nitro, dimethylamino-hexatriene as test compound (1) and the B3LYP level of theory using different base sets (6-31G*, 6-311G*, 6-311G**, 6-31G**, 6-31+G*, 6-311+G*, 6-311+G**, cc-pVDZ, cc-pVTZ, and aug-cc-pVTZ) with taking into account the effects of acetonitrile solvent using the IEFPCM scheme.

The results for basis sets effects on the static and dynamic $\beta_{||}$, β_{vec} and β_{HRS} of the trans α,ω -nitro, dimethylamino-hexatriene determined at the B3LYP level are presented in figure 2a and 2b and Table S2 (Supporting information). These results show that the largest basis set aug-cc-pVTZ, the smallest 6-31G* and the rather extended cc-pVTZ provides the largest and the smallest values respectively. The variations in β_{HRS} upon adding diffuse polarization, or valence functions in the basis set are similar, but the agreement with the reference values is partially different. So, though the 6-31+G* and 6-311+G* basis set reproduces the aug-cc-pVTZ result within 5.52% and 4.25% respectively. This difference increases to about 27.28% for the 6-31G* values and by 31.70% to 18.22% for the moderately extended cc-pVDZ and cc-pVTZ basis sets respectively. Adding diffuse functions in the basis set has a small impact on the agreement with more complete basis sets. Indeed, although the difference in β between the 6-31G* and 6-311G* basis sets and the 6-31+G* basis sets attains 27%–31%, the amplitude of the deviations with respect to the aug-cc-pVTZ basis set is similar and fluctuates between 5% and 27%. These results also demonstrates that the effect of polarization functions is seen very clearly, *d*-polarization functions tend to decrease in the hyperpolarizabilities magnitude of both β_{HRS} and $\beta_{||}$. Whereas the *p*-polarization functions leads to smaller changes. Going from a double- ζ to a triple- ζ basis set leads an increase but not dramatic on hyperpolarizabilities. When adding diffuse functions this always leads to an increase in β_{HRS} values. It can be concluded that diffuse and polarization functions lead to opposite trends for β_{HRS} . Several studies have demonstrated that the use of a split-valence or split-valence plus polarization basis set augmented with a set of *p* and *d* diffuse functions on the second row atoms enables the reproduction of hyper-polarizability of large- and medium-size Π -conjugated systems calculated

with larger, and computationally less affordable, basis sets [29,30]. The basis set effects on the depolarization ratios (DR) are negligible (see Table S2 Supporting information).

In summary, the influence of the basis set on the β quantities is generally important. Considering the interplay between accuracy and computational requirements, the 6-311+G* and 6-31+G* basis set was selected for the rest of the study.

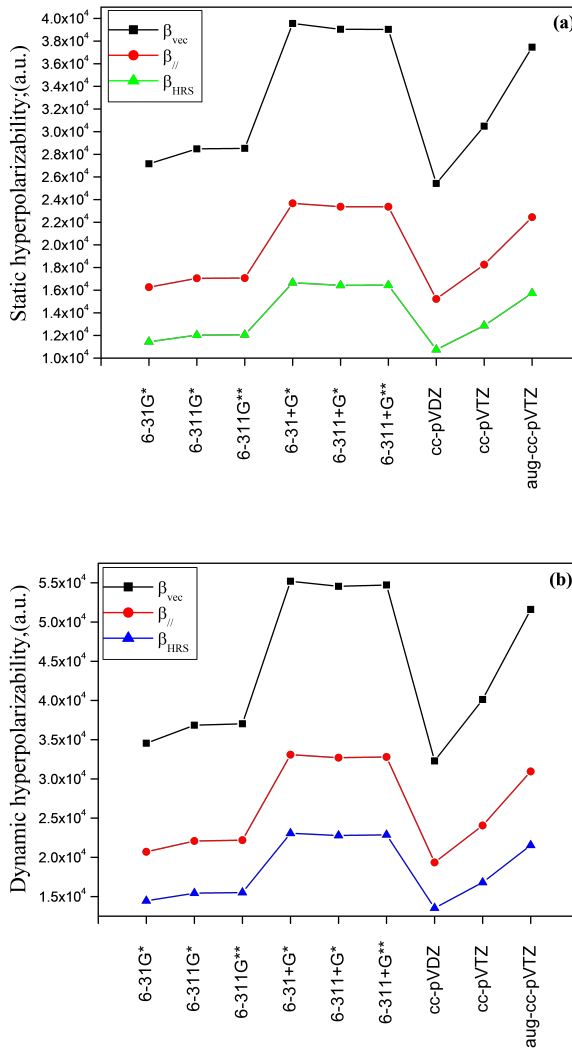


Figure 2. Basis sets effects on the static (a) and dynamic (b) hyperpolarizability: $\beta_{||}$, β_{vec} and β_{HRS} for the trans α,ω -nitro, dimethylamino-hexatriene determined at the B3LYP level within the IEFPCM scheme and acetonitrile as solvent.

III.3. Assessment of the DFT functionals to evaluate the first hyperpolarizability

Reliable predictions of β quantities at the density functional (DFT) level of theory using the 6-31+G* basis set requires the study of the impact of the exchange correlation (XC) functionals (LC-BLYP, B3LYP, B3P86, CAM-B3LYP, M052X, M05, M062X and BHandHLYP). The results collected in Table S3 (Supporting information) and displayed in figure 3, highlights the impact of the electron correlation on the

assessment of the static and dynamic first hyperpolarizability β_{vec} , $\beta_{||}$ and β_{HRS} , depolarization ratio (DR) and anisotropy factor (ρ) of the trans α,ω -nitro,dimethylamino-hexatriene.

The results in Table S3 (Supporting information) highlight the impact of the electron correlation on the assessment of hyperpolarizabilities $\beta_{||}$ and β_{HRS} and depolarization ratio (DR) for isolated all trans α,ω -nitro,dimethylamino-hexatriene using 6-31+G* basis set: (i) As shown in figure 3a, the effects of electron correlation are much larger for the static first hyperpolarizabilities. The $\beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(HF)$ and $\beta_{||}(MP2)/\beta_{||}(B3LYP)$ ratios are close to 2.43 and 1.37, respectively.

(ii) the $\beta^{HRS}(SCS - MP2)/\beta^{HRS}(HF) = 2,48$ and $\beta^{HRS}(SCS - MP2)/\beta^{HRS}(B3LYP) = 1,73$. The β^{HRS} difference between MP2 and SCS-MP2 is 2.02 % only.

(iii) At the DFT approach, the M05 functional behaves badly, leading to an overestimations of β_{HRS} by 44.53 % when compared to the MP2 level. The calculated ratio $\beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(M05)$ is close to 1.80. Whereas it is often ranging between $\beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(X) = 1,37$ and 1.73 for the others DFT approaches.

The effects of electron correlation might be much different from one exchange correlation (XC) functional to another. This statement is verified for analogous DFT approaches: $\beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS} = 1,80 > \beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(B3P86) = 1,73 > \beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(B3LYP) = 1,70 > \beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(BHandHLYP) = 1,61 > \beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(M052X) = 1,51 > \beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(CAM - B3LYP) = 1,44 > \beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(M062X) = 1,42 > \beta^{HRS}(MP2)/\beta^{HRS}(LC - BLYP) = 1,37$.

The values obtained at the MP2 level of theory appear to be in better agreement with the calculated LC-BLYP, M062X, CAM-B3LYP and M052X functionals, the ratios are rather small. However, slightly worse agreement is obtained for the B3LYP, B3P86 and M05 functionals, even though M05 method show more significant overestimation of the first hyper- polarizability β_{HRS} .

The β_{HRS} predicted by LC-BYLYP, CAM- M062X and CAM-B3LYP are almost the same and are comparable with those obtained by MP2 method.

(iv) the DR ranges from 4.60 to 4.74 as a function of the approximation level. However, MP2 and SCS-MP2 methods produce typical values of dipolar compound DR=4.90 and 4.93, respectively. The ratio between the references methods DR (SCS-MP2)/DR (MP2) is close to 1.01(Table S4 Supporting information).

(v) The electron correlation effects on $\beta_{||}$ leads to an important increase with a factor $\beta_{||}(MP2)/\beta_{||}(X)$ ranging from 0.34 for LC-BLYP to 2.55 for HF method. The ratio between the reference method $\beta_{||}(MP2)/\beta_{||}(SCS - MP2)$ is close to 0.97. At 6-31+G* basis set the $\beta_{||}$ (parallel) presents the highest value of 23673 (a.u.) at the LC-BLYP functional.

(vi) For the dynamic hyperpolarizability in figure3b, the reference MP2 method give the highest β_{HRS} value of 26465.58(a.u.). When considering XC functionals, the

BHandHLYP, M05, M052X, LC-BLYP and B3P86 functionals behaves poorly, leading to an underestimations of the β_{HRS} by 23 %, 14.71 %, 13.82 %, 12.84 % and 12.70 %, respectively. Fort the M062X, CAM-B3LYP and B3LYP functionals a much better agreement is observed, they appear to behave in a similar manner with the MP2 results the differences are 5.96 %, 6.30 % and 7.30 %, respectively.

The β_{HRS} predicted by B3LYP, B3P86 and M062X are almost the same and are comparable with those obtained by MP2 method. In addition, results obtained for the static and dynamic depolarization ratio $DR(1046 \text{ nm})/DR(\infty)$ appear to be close to 1.00 (Table S4 supporting information).

(vii)The calculated contrasts between the dynamic and static HRS first hyper-polarizability using the $\beta^{HRS}(1046 \text{ nm})/\beta^{HRS}(\infty)$ ratios are ordered as follows: 0.44 for LC-BLYP, 1.74 for MP2 and SCS-MP2, 2.24 for M062X, 2.22 for M052X, 2.57 for M05 and 2.63 for B3LYP. The same trend was observed for $\beta_{||}$ with $\beta_{||}(1046 \text{ nm})/\beta_{||}(\infty)$ ranges from 0.44 to 2.68.

From the calculated dynamic first hyperpolarizability for all trans α,ω -nitro,dimethylamino-hexatriene, we observed a small difference between the DFT and MP2 results. However, an exception is observed for M05 and BHandHLYP functionals which are not recommended for the determination of the static and dynamic HRS first hyperpolarizability. Also, we propose scaling β_{HRS} values at B3LYP/ 6-31+G* by factors of 1.14 and 1.73 to obtain the MP2 dynamic and static β_{HRS} at a low computational cost.

III.4. Electron correlation effects on the first hyperpolarizability

The electron correlation effects were carried out using the second-order Møller-Plesset (MP2) approximation as a reference method. Then, the validity of MP2 calculations has been verified by the MP4 (fourth-order electron correlation) and the reference techniques CCSD(T). The results of electron correlation impact on the static and first hyperpolarizabilities (β_{HRS}) of the typical trans α,ω -nitro,dimethylamino-hexatriene are given in figure 4 and Table S5 (Supporting information).

The effects of electron correlation are much larger for the first hyperpolarizability β_{HRS} , the HF and DFT methods leads to the first hyperpolarizability (β_{HRS}) values smaller with the corresponding reference CCSD(T) results. The HF method with basis sets lacking diffuse functions underestimates β values by about 54.56 %.

However, including diffuse functions in the basis set leads to an underestimation of 3.43 %. The $\beta(HF)/\beta(CCSD(T))$ ratios are growing from 0.43 to 0.47 for the used 6-31+G*, 6-311G* and 6-31G* basis sets. A difference between 3 % to 6 % was observed for basis sets with and without diffuse functions (6-31+G*/aug-cc-pVDZ and 6-31+G*/ aug-cc-pVTZ).

For the DFT method within the B3LYP functional, the electron correlation effects on β_{HRS} are much smaller and increase by 27-35 %. The $\beta(B3LYP)/\beta(CCSD(T))$ ratios are 0.74, 0.75 and 0.76 for 6-31G*, 6-311G* and 6-31+G* basis sets, respectively.

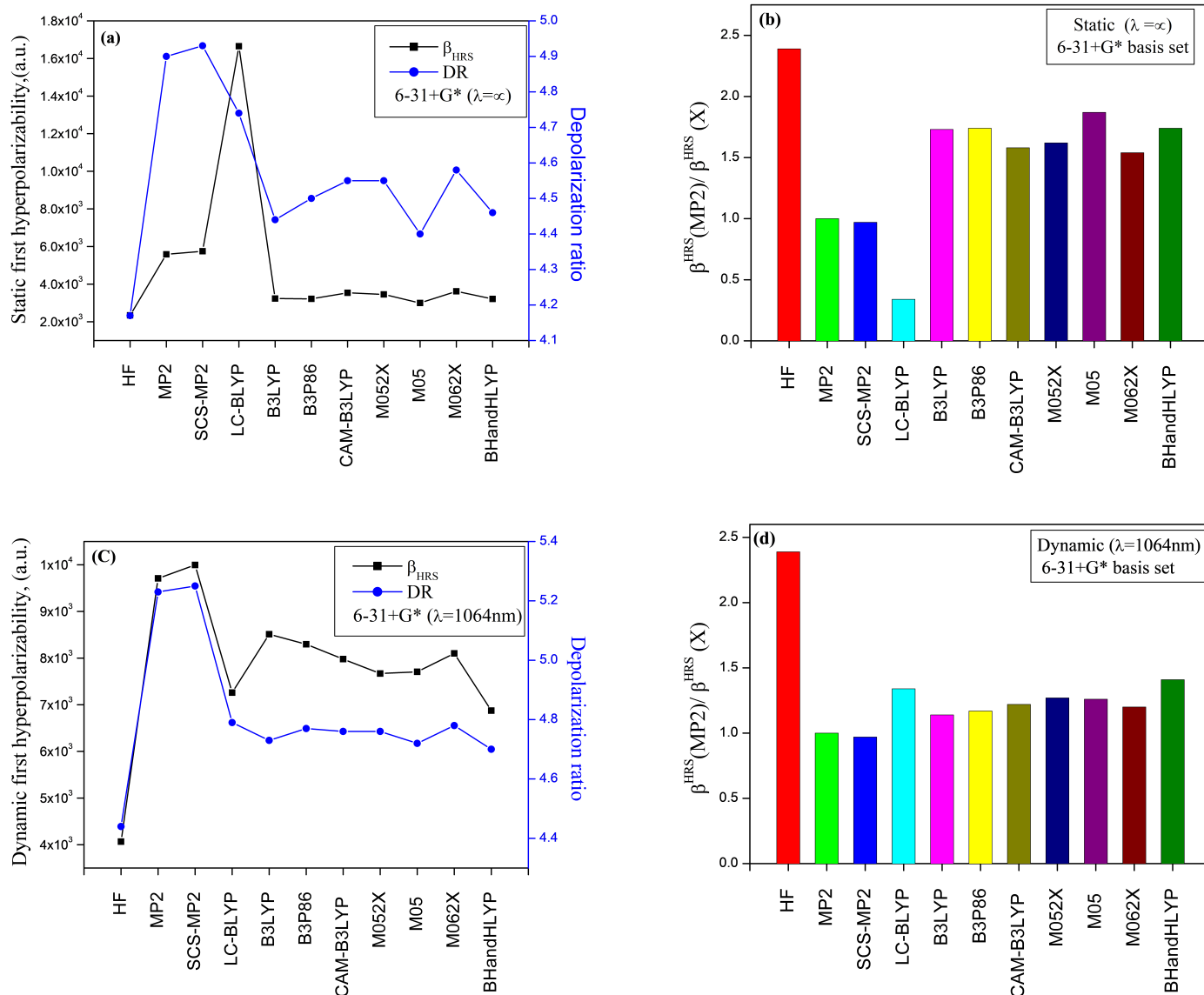


Figure 3. Effect of electron correlation on the static and dynamic HRS first hyperpolarizability and depolarization ratio (a and c); β_{HRS} contrasts for all trans α,ω -nitro,dimethylamino-hexatriene calculated at various levels of approximation with the 6-31+G* basis set (b and d).

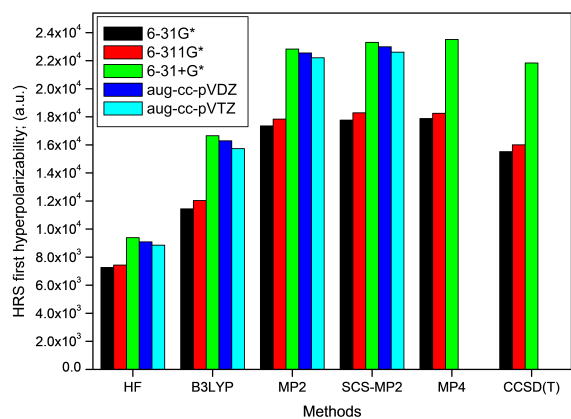


Figure 4. Static first hyperpolarizabilities (β_{HRS}) of all-trans α,ω -nitro,dimethylamino-hexatriene at different levels of calculation for the isolated molecule.

The first hyperpolarizability exhibit stronger dependence on the basis set and these effects are enhanced from the smallest 6-3G* to the largest aug-cc-pVTZ by 34% to 29%. However, the 6-31+G* β_{HRS} values are similar to those evaluated at aug-cc-pVDZ and aug-cc-pVTZ basis sets.

When going from the 6-31G* to the aug-cc-pVTZ basis set, the MP2 (6-31G*)/ B3LYP (6-31+ G*) and MP2(aug-cc-pVTZ)/ B3LYP(aug-cc-pVTZ) ratio ranges between 1.37 to 1.41, leading to a difference of 0.04. The results leads to state that, basis sets like 6-31+G*, aug-cc-pVDZ and aug-cc-pVTZ are enough to provide accurate estimation and ensuring the best computational costs.

Moving from MP2 to MP4 leads to a small increase of β_{HRS} , the difference between MP2 and MP4 is less than 3%. While, the computational cost with MP4 is largely increased compared to MP2. Moreover, when using a basis set with diffuse functions

the difference between the MP2, MP4 and CCSD(T) is smaller and decrease by 11 % and 13 % respectively.

The MP2 scheme provides first hyperpolarizability values in good agreement with the CCSD (T) and MP4 results, the estimated MP2/CCSD(T) ratios using the 6-31G*, 6-311G* and 6-31+G* basis sets range from 1.12 to 1.05.

III.5. Substitution effects on first hyperpolarizability (β_{HRS})

The calculated static and dynamic hyper-Rayleigh scattering (HRS) first hyperpolarizability (β_{HRS}), electric field-induced second harmonic generation (EFISHG) first hyperpolarizability ($\beta_{||}$), depolarization ratio (DR) and the nonlinear anisotropy parameter (ρ) for the solvated and isolated all trans hexatriene $\text{NO}_2-(\text{CH}=\text{CH})_3-\text{D}$ (figure 5) are given in figure 6.

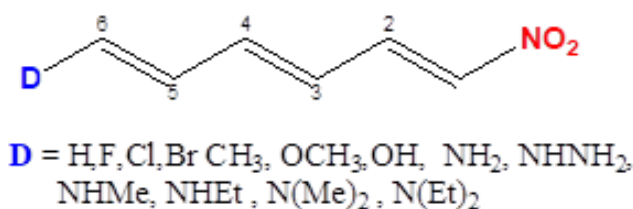


Figura 5. Molecular structures of substituted all-trans hexatriene $\text{NO}_2-(\text{CH}=\text{CH})_3-\text{D}$.

The results in figure 6a and 6b and Table S6 (Supporting information) established the influence of different donor substituent on the β_{HRS} of substituted oligomer ($\text{D}-\pi-\text{NO}_2$). The β_{HRS} value of the mono-substituted $\text{H}-\pi-\text{NO}_2$ all-trans hexatriene 1 is rather small, supporting the absence of strong donor groups. The β_{HRS} values for isolated molecules are the largest for the disubstituted hexatriene than for the mono substituted ones, a remarkable increase of the β_{HRS} is observed for diethylamino $-\text{NEt}_2$ and dimethylamino $-\text{NMe}_2$ electron-donating groups, the $\beta_{HRS}^\infty(\text{NO}_2, \text{NMe}_2)/\beta^\infty(\text{NO}_2, \text{H}) = 3,78$ and $\beta_H^{1064} \text{RS}(\text{NO}_2, \text{NMe}_2)/\beta^{1064}(\text{NO}_2, \text{H}) = 4,37$.

In general, one can observe that if β_{HRS} and $\beta_{||}$ of a structure are strongly enhanced by the presence of NO_2 group, β_{HRS} and $\beta_{||}$ are also substantially enhanced by the pair of $-\text{NO}_2/-\text{N}(\text{Et})_2$. This behavior tends to attribute to the hexatriene backbone's ability to exhibit smaller or larger first hyperpolarizabilities. Indeed, including solvent effects increases static and dynamic β_{HRS} of most substituted hexatriene by 52~ 70 % and 68-76.50 %, respectively.

The static ($\lambda = \infty$) enhancement factor for β_{HRS} goes from 1.10 to 4.62 against 1.10 to 5.54 for the dynamic ($\lambda = 1064 \text{ nm}$) case. The β_{HRS} amplitudes ordering changes with respect to the strength of substituted groups. In addition, large β_{HRS} are illustrated by the solvated (acetonitrile) compounds 12 and 13, while their DR are also the largest. The relative amplitudes are quantified by the static ratio $\beta_{HRS}^\infty(\text{NO}_2, \text{NMe}_2)/\beta^\infty(\text{NO}_2, \text{H}) = 4,26$ and $\beta_{HRS}^\infty(\text{NO}_2, \text{NMe}_2) > \beta^\infty(\text{NO}_2, \text{H}) = 4,62$, the dynamic ratio $\beta_H^{1064} \text{RS}(\text{NO}_2, \text{NMe}_2)/\beta^{1064}(\text{NO}_2, \text{H})$ close to 4.87 and

$\beta_H^{1064} \text{RS}(\text{NO}_2, \text{NMe}_2)/\beta^{1064}(\text{NO}_2, \text{H}) = 5,54$. The smallest β_{HRS} values are observed for substituted halogen groups 1, 2, 3, 4, and 5. Compounds with hydroxyl $-\text{OH}$ and alkoxy $-\text{OCH}_3$ substituted groups (6 and 7) display an HRS response of intermediate amplitude. Turning to the $\beta_{||}$ response the same behavior is observed, compounds 13 and 12 possess the largest values whereas the smallest $\beta_{||}$ responses are characteristics of compounds 1-5, those with halogens ($-\text{Cl}$, $-\text{Br}$ and $-\text{F}$) and methyl $-\text{CH}_3$ substituted donor groups. Considering the DR quantities, compounds 13 and 12 also possess the largest values whereas the smallest DR values are associated with compounds 1 and 2. Finally, the largest β_{HRS} , $\beta_{||}$ and DR are achieved by compounds 13 and 12 having the most voluminous substituted electron-donating groups, considering the effect of the solvent (acetonitrile) and the strength of each substituted electron-donating groups (1-13) we propose similar decreasing ordering of β_{HRS} for the solvated and isolated disubstituted all-trans hexatriene at ($\lambda = \infty$) and ($\lambda = 1064 \text{ nm}$): $13 > 12 > 11 > 10 > 9 > 8 > 7 > 6 > 5 > 4 > 3 > 2 > 1$.

Looking further at the solvent effects, the calculated static ($\lambda = 0$) and dynamic ($\lambda = 1064 \text{ nm}$) first hyperpolarizability (β_{HRS}) obtained in vacuum and in acetonitrile. As shown in figure 6a and 6b, the solvent effect significantly enhances the dynamic first hyperpolarizability (β_{HRS}) of the substituted hexatriene by a factors ($\beta_{HRS}^{\text{sol}}(1064 \text{ nm})/\beta_{HRS}^{\text{vac}}(1064 \text{ nm})$) ranging from 2.10 for (NO_2, Br) to 2.71 for ($\text{NO}_2, \text{NMe}_2$). However, the static ones are somewhat smaller the corresponding ratios ($\beta_{HRS}^{\text{sol}}(\infty)/\beta_{HRS}^{\text{vac}}(\infty)$) range from 3.14 for ($-\text{NO}_2, -\text{Cl}$) to 4.081 for ($-\text{NO}_2, -\text{NMe}_2$).

The HRS first hyperpolarizabilities β_{HRS} in acetonitrile increases even more rapidly than in vacuum, with increasing the strengthening of each electron-donating group (D), the curves display an accelerating trend rather than a linear relationship revealing a pronounced strengthening electron-donating effect encountered for alkylamine groups $-\text{NMe}_2$ and $-\text{Net}_2$ leading to significant enhancement of the β_{HRS} response.

The depolarization ratios (DR) for all substituted molecules are near the typical value of 5. In addition, for the dynamic and the static case the ratios $\text{DR}^{\text{sol}}(1064 \text{ nm})/\text{DR}^{\text{vac}}(1064 \text{ nm})$ range from 1.03 to 1.05 and $\text{DR}^{\text{sol}}(\infty)/\text{DR}^{\text{vac}}(\infty)$ range from 1.01 to 1.03, respectively. Acetonitrile solvent has little effect on the depolarization ratio (DR).

In order to clarify the solvent effects on the β_{HRS} for each substituted molecules, we plot in figure 6c and 6d the variation of the static and dynamic β_{HRS} for isolated and solvated (acetonitrile) molecules versus their values in vacuum.

The results for the solvated static ($\lambda = \infty$) first hyperpolarizability of each substituted hexatriene molecule versus its static value in vacuum shows a good linear relationship ($R = 0.99$) with the slope of 4.47, revealing that the solvent has a consistent influence to this class of substituted hexatriene. However, the link between the dynamic ($\lambda = 1064$) first hyperpolarizability β_{HRS} in acetonitrile versus its value in vacuum lead to an excellent linear relationship characterized by a positive slope $\beta_{HRS}^{\text{sol}}(1064 \text{ nm})/\beta_{HRS}^{\text{vac}}(1064 \text{ nm}) = 2,94$ and

a correlation coefficient close to 1.00. This result indicates that the solvent enhances the first hyperpolarizabilities significantly by an amplitude depending on the strength of the substituted groups. Also, an excellent relationship was

established between the static and dynamic β_{HRS} for isolated and solvated molecules, allowing an easy determination of β values.

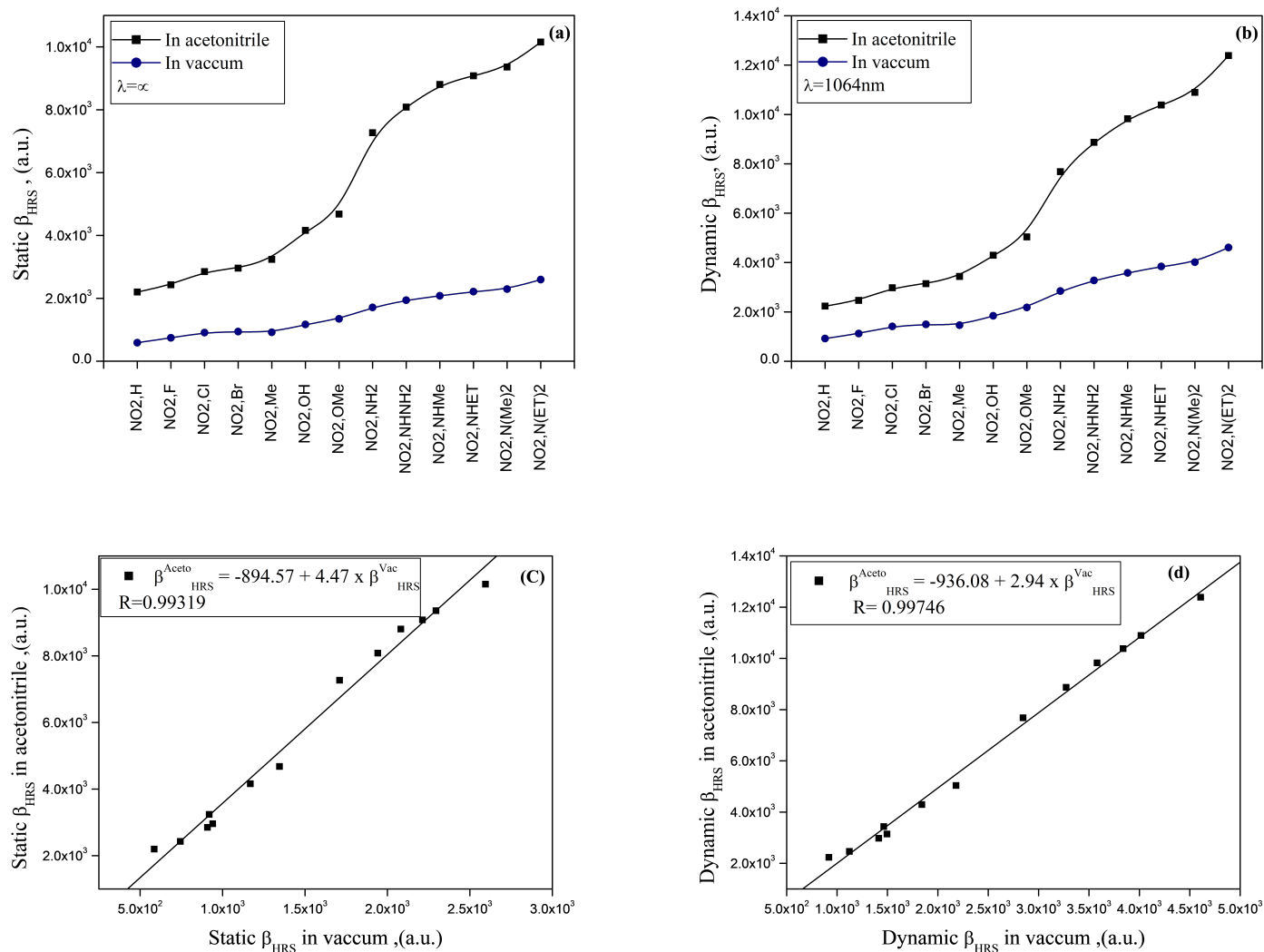


Figura 6. Static (a) and dynamic (b) β_{HRS} for isolated and solvated (acetonitrile) substituted molecules; β_{HRS} in acetonitrile versus its value in vacuum of each substituted molecule (c and d).

III.6. Dependence of β_{HRS} on the dipolar/octupolar components of the first hyperpolarizability

In order to compare the contribution of the dipolar and octupolar components to the static and dynamic first hyperpolarizability β_{HRS} response considering the solvated (acetonitrile) substituted hexatriene molecules. The β tensor is decomposed into the $|B_j = 1|$ (dipolar) and $|B_j = 3|$ (octupolar) components.

The DR, as well as the dipolar $[\Phi|B_j = 1| = 1/(1 + \rho)]$ and octupolar $[\Phi|B_j = 3| = \rho/(1 + \rho)]$ contributions to first hyperpolarizability β_{HRS} response with respect to the nonlinear anisotropy parameter ρ is displayed in figure 7a and 7b to provide a quantitative classification

of the substituted hexatriene systems in term of their dipolar/octupolar character.

From Fig.6a, for the static case ($\lambda = \infty$) a large amount of the disubstituted hexatriene molecules with the largest and strongest substituents characterized by nitrogen (N) atom at the donor groups like ($-\text{NH}_2$, $-\text{NHNH}_2$, $-\text{NHMe}$, $-\text{NHET}$, $-\text{NMe}_2$ and $-\text{NEt}_2$) fall in the area of the $\rho \leq 1$ axis, indicating that most of them correspond to a more pronounced dipolar character. Moreover, for the weak substituted electron-donor groups: alkyl, alkoxy, hydroxyl and halogens ($-\text{CH}_3$, $-\text{OCH}_3$, $-\text{OH}$, and $-\text{F}$) the anisotropy factor is slightly higher than unity ($\rho \approx 1$) and ranging from 1.03 for ($-\text{OH}$ and $-\text{OCH}_3$) to 1.08 for ($-\text{F}$). In addition, all-trans substituted hexatriene molecules fit into the dipolar molecules with the dipolar

contribution [$\Phi|B_j = 1|$] of 48-50%. Nevertheless, these dipolar molecules should be further divided into two categories, including substituted electro-donating groups (1) $-H$, $-Br$, $-CH_3$ and $-OH$ belonging to category A with the dipolar contribution [$\Phi|B_j = 1|$] of 48-49% and (2) $-F$, $-Cl$, $-OCH_3$, $-NH_2$, $-NHNH_2$, $-NHMe$, $-NHET$, $-NMe_2$ and $-NEt_2$ to category B with the dipolar contribution [$\Phi|B_j = 1|$] of 50%. An exception is noted for the monosubstituted ($-NO_2$, $-H$) and the disubstituted ($-NO_2$, $-F$) which can be considered as weak octupolar molecules with the [$\Phi|B_j = 3|$] of 54 and 52% and an anisotropy factor close to $\rho = 1,17$ and 1.08 \hat{z} 1.

The situation is different when considering the frequency dependence ($\lambda = 1064$ nm), as can be seen in figure 7b all

molecules manifest pure dipolar character with the dipolar contribution [$\Phi|B_j = 1|$] of 51-53% and fall in the area where the anisotropy factor is clearly $\rho < 1$. However, the octupolar contribution [$\Phi|B_j = 3|$] ranges from 51 for ($-NO_2$, $-H$) to 47% for ($-NO_2$, $-NEt_2$). In addition, As shown in figure 7a, the depolarization ratio value decreases with increasing the anisotropy factor ρ from 4.28 for ($-NO_2$, $-NEt_2$) to 3.74 for ($-NO_2$, $-H$), covering the anisotropy factor range from 1.00 to 1.17 at ($\lambda = \infty$) and from 4.64 for ($-NO_2$, $-NEt_2$) to 4.18 for ($-NO_2$, $-H$), covering the anisotropy factor range from 0.90 to 1.02. In all the cases, the dipolar contribution decreasing order is as follows: $13 > 12 > 11 > 10 > 9 > 8 > 7 > 6 > 5 > 4 > 3 > 2 > 1$, and the octupolar sequence is just the reverse.

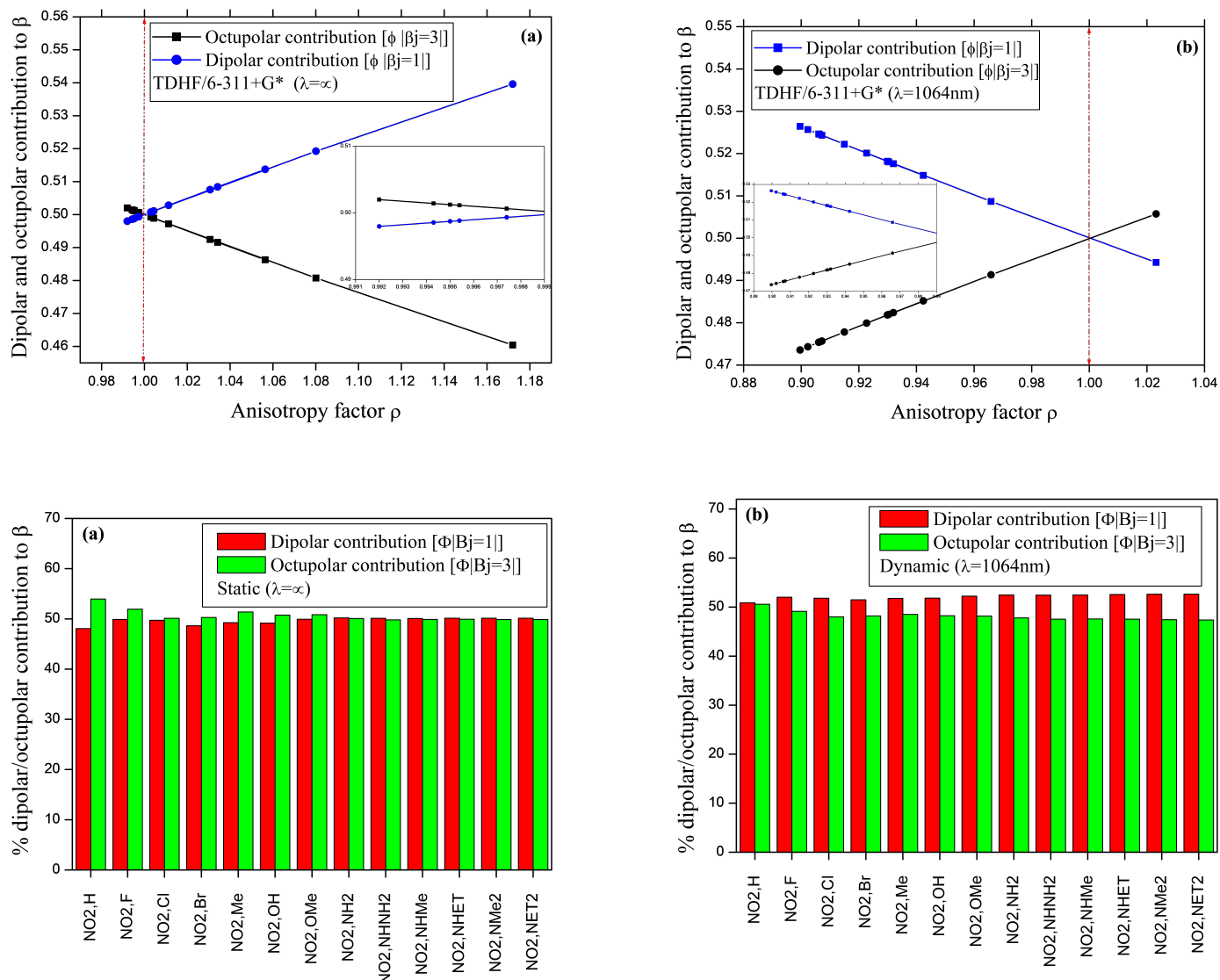


Figure 7. Evolution of static (a) and dynamic (b) depolarization ratio DR as well as the dipolar [$\Phi|B_j = 1|$] and octupolar [$\Phi|B_j = 3|$] contributions to the β_{HRS} response as a function of anisotropy factor ρ within the IEFPCM (acetonitrile) scheme.

IV. CONCLUSIONS

In this work, we have investigated the geometrical structure and first hyperpolarizabilities of substituted push-pull oligomer using theoretical chemistry methods. First, the geometries of the ground state have been optimized at the B3LYP/6-311G* level. Then, reliable atomic basis sets for computing the first hyperpolarizability (β_{HRS}) have been selected. Several DFT XC functionals, have then been used to calculate the variations of the first hyperpolarizabilities (β_{HRS}). The electron correlation effects were carried out using the MP2 level and the validity of the chosen method is further demonstrated by considering the CCSD(T) results.

The main results in this work include: Reliable predictions of static and dynamic β values requires (i) To assess the importance of the electron correlation effects; (ii) To choose an extended basis set including in most cases one or more sets of diffuse functions (like 6-31+G*, 6-311+G*, aug-cc-pVTZ and aug-cc-pVDZ); (iii) to account for the effects of frequency; (iv) The correlation between the β values obtained with MP2, MP4, B3LYP, CAM-B3LYP, B3LYP and M062X methods is generally very good. In particular, with considering the solvent effects the B3LYP, CAM-B3LYP and M062X values are very similar; (iv) The solvent effects within the IEFPCM scheme leads to a preferential enhancement of the first hyperpolarizability of the Nitro-alkyl amine (NO₂/NHMe, NHEt, NMe₂ and NEt₂) substituted hexatriene oligomers; (v) When placing NO₂, NEt₂ groups at terminal position, the all-trans hexatriene presents the largest β response with a depolarization ratio close to 5. However, β_{HRS} decreases when adding halogenes (F, Cl and Br) or alkyl (CH₃) groups; (vi) All substituted molecules manifest dipolar character with a dipolar contribution [$\Phi|B_j = 1|$] > 50%. The theoretical separation of the octupolar/dipolar contributions to the first hyperpolarizability lets us control the second-order NLO response by varying the strength of the substituted donor/acceptor groups.

REFERENCES

- [1] P. Gunter, *Nonlinear Optical Effects and Materials*, Springer, (Berlin, Heidelberg, New York, 2000)
- [2] H.S. Nalwa, *Organic Electronics and Photonics*, (American Scientific Publishers, USA, 2008).
- [3] R. Hadfield, *Nat. Photonics*, **3**, 696 (2009)
- [4] H.S. Nalwa, *Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices*, Nonlinear Optical Materials, (Academic Press, New York, 2001)
- [5] J. Zyss, J. L. Oudar, *Phys. Rev. A*, **26**, 2028 (1982).
- [6] M. Torrent-Sucarrat, M. Sola, M. Duran, J. M. Luis, and B. Kirtman, *J. Chem. Phys.* **118**, 711(2003).
- [7] R. Zalesny, W. Bartkowiak, P. Toman, J. Leszczynski, *Chem. Phys.* **337**, 77 (2007).
- [8] T. H. Dunning, *J. Chem. Phys.* **90**, 1007 (1989)
- [9] D. Jacquemin, B. Champagne, C. Hättig, *Chem. Phys. Lett.* **319**, 327 (2000).
- [10] B. Skwara, W. Bartkowiak, A. Zawada, R. W. Gora, and J. Leszczynski, *Chem. Phys. Lett.* **436**, 116 (2007).
- [11] A. D. Becke, *Phys. Rev. A*, **38**, 3098 (1988).
- [12] C. Adamo and V. Barone, *J. Chem. Phys.* **110**, 6158(1999).
- [13] A. M. Masunov and S. Tretiak, *J. Phys. Chem. B*, **108**, 899 (2004).
- [14] H. Sekino, R. J. Bartlett, *J. Chem. Phys.* **85**, 976 (1986).
- [15] S. J. A. Van Gisbergen, J. G. Snijders, E. J. Baerends, *J. Chem. Phys.* **109**, 10657 (1998).
- [16] J. Tomasi, B. Mennucci, R. Cammi, *Chem. Rev.* **105**, 2999 (2005).
- [17] A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **98**, 5648 (1993).
- [18] E.Y. Zhao, N. Schultz, D. G. Truhlar, *J. Chem. Phys.* **123**, 161103 (2005).
- [19] H. Iikura, T. Tsuneda, T. Yanai, K. Hirao, *J. Chem. Phys.* **115**, 3540 (2001).
- [20] T. Yanai, D. P. Tew, N. C. Handy, *Chem. Phys. Lett.* **393**, 51 (2004).
- [21] Y. Zhao, D. G. Truhlar, *Theor. Chem. Acc.* **120**, 215 (2008).
- [22] A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **98**, 1372 (1993).
- [23] S. J. Vosko, L. Wilk, M. Nusair, *Can. J. Phys.* **58**, 1200(1980).
- [24] A. Plaquet, M. Guillaume, B. Champagne, L. Rougier, L. Mancois, V. Rodriguez, J. L. Pozzo, D. Lucasse, F. Castet, *J. Phys. Chem. C*, **112**, 5638 (2008).
- [25] E. Bogdan, A. Plaquet, L. Antonov, V. Rodriguez, L. Ducasse, C. Benoit, F. Castet, *J. Phys. Chem. C*, **114**, 12760 (2010).
- [26] M. Yang, B. Champagne, *J. Phys. Chem. A*, **107**, 3942 (2003).
- [27] D. Jacquemin, B. Champagne, C. Hättig, *Chem. Phys. Lett.* **319**, 327 (2000).
- [28] M J Frisch et al. *Gaussian 09*, Revision C. 01. Wallingford CT. (2010)
- [29] N. S. Labidi, M. Benali Kanoun, M. De Wergifosse, B. Champagne, *Int. J. Quantum Chem.* **111**, 1583 (2011).
- [30] N.S. Labidi, A. Djebaili, I. Rouina, *J. Saudi Chem. Soc.* **15**, 29 (2011).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



MORFOLOGÍA DEL GRANO EN PIEZOCERAMICAS $\text{KNNLiLaTa}_{0,1}$ OBTENIDAS MEDIANTE EL PRECURSOR NaNbO_3

GRAIN MORPHOLOGY IN $\text{iLaTa}_{0,1}$ PIEZOCERAMICS OBTAINED BY NaNbO_3 PRECURSOR

J.F. REBELLÓN-WATSONA^{†a}, R. LÓPEZ-NODA^a, J. FUENTES^b, J. PORTELLES^{a,b}

a) Instituto de Cibernética, Matemática y Física, la Habana, Cuba; julia@icimaf.cu[†]

b) Facultad de Física, Universidad de la Habana, la Habana, Cuba

[†] autor para la correspondencia

Recibido 25/7/2021; Aceptado 25/10/2021

Hoy día existe consenso sobre la necesidad de sintetizar piezocerámicas libres de plomo. En este trabajo, se obtuvieron y caracterizaron cerámicas $\text{KNNLiLaTa}_{0,1}$ que cumplen dicho requisito, usando como precursor el NaNbO_3 . A través de SEM, en el caso del NaNbO_3 , se observó una morfología de granos en forma de placas rectangulares de pequeño espesor. En embargo, en el $\text{KNNLiLaTa}_{0,1}$, la morfología es de granos poliédricos con unas dimensiones mucho menores que las de su precursor y presenta una distribución bimodal debido a la presencia de algunos dopantes como el Lantano.

Nowadays, there is consensus about the relevance of lead-free piezoceramics. In this work $\text{KNNLiLaTa}_{0,1}$ ceramics fulfilling that requisite were obtained using NaNbO_3 as precursor. By means of SEM, NaNbO_3 showed a grain morphology consisting in thin rectangular platelets. However, in $\text{KNNLiLaTa}_{0,1}$ the grains were polyhedral, with dimensions much smaller than those of the precursor grains, showing a bimodal distribution due to the presence of some dopants, like Lanthanum.

PACS: Antiferroelectric materials (materiales antiferroeléctricos), 77.84.-s; X-ray diffraction (difracción de rayos X), 61.05.cp; electron beam induced current (corriente inducida por haz de electrones), 68.37.Hk

I. INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la mayor parte de las producciones de dispositivos industriales que contienen materiales piezoeléctricos utilizan el compuesto titanato zirconato de plomo (PZT) por sus altos valores de permitividad dieléctrica y eficiencia electromecánica. Sin embargo, por sus altos contenidos de plomo, varios convenios europeos sobre la protección de la salud y del medio ambiente, incluyen al PZT en la lista de sustancias nocivas que no deben emplearse en dispositivos electrónicos.

En el año 2004, Saito y colaboradores obtuvieron una piezocerámica libre de plomo tipo $\text{KxNa}_{1-x}\text{NbO}_3$ (KNN), dopada con litio, tantalio y antimonio, con propiedades dieléctricas y piezoeléctricas comparables a las del PZT [1]. Dicho estudio plantea que las propiedades del KNN mejoran si se parte de la utilización del precursor neobato de sodio (NaNbO_3). Este se obtiene a partir de una reacción topoquímica entre el $\text{Bi}_{2/5}\text{Na}_{3/5}\text{Nb}_5\text{O}_{18}$ (BINN5) y el Na_2CO_3 .

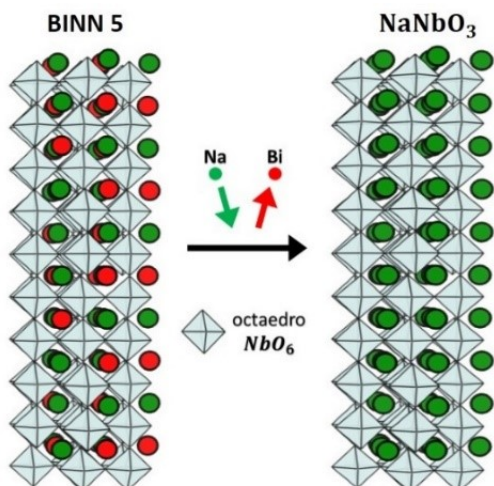


Figura 1. Esquema de la reacción topoquímica entre el BiINN_5 y el Na_2CO_3 formándose NaNbO_3 . Las figuras fueron realizadas en el software Vesta [5].

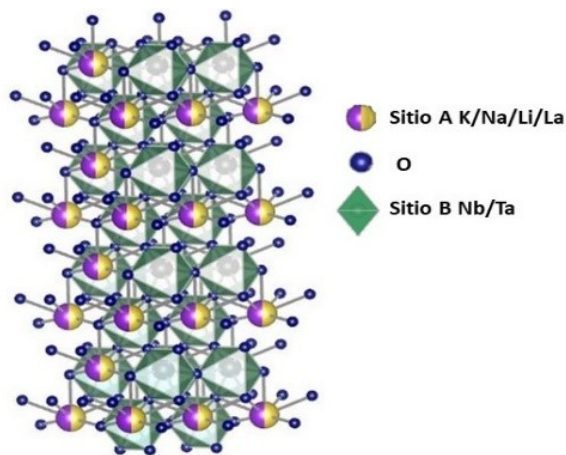


Figura 2. Representación de la estructura cristalina del $\text{KNNLiLaTa}_{0,1}$.

Este método presenta como resultado en el precursor obtenido, granos con una morfología en forma de placas delgadas y una estructura tipo BiINN_5 , donde los cationes Na_{+1} sustituyen a los de Bi_{+1} conservando su estructura original, como se observa en la figura 1.

Basándose en el método utilizado por Saito y colaboradores, se han realizado estudios acerca del comportamiento dieléctrico del KNN, variando el tipo de dopante y las concentraciones de los mismos [2–4].

En este trabajo se realiza el estudio de DRX (Difracción de Rayos X) y de SEM (Microscopía Electrónica de Barrido) para la morfología del precursor NaNbO_3 y del sistema KNN dopado. También se establece la correlación que existe entre las propiedades microestructurales de este precursor con las propiedades del $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$. En la figura 2 se muestra la estructura cristalina teórica de este sistema realizadas en el software Vesta [5].

II. DETALLES EXPERIMENTALES

El sistema NaNbO_3 se obtuvo por el método de sales fundidas [6], a partir de una reacción topoquímica entre BiNN_5 y Na_2CO_3 a 950°C , usando NaCl como fundente. Posteriormente, se realizaron reiteradas lavadas a la muestra NaNbO_3 para eliminar el bismuto en el sistema.

El sistema $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$ fue sinterizado a partir del precursor NaNbO_3 obtenido y los siguientes carbonatos y óxidos: K_2CO_3 , La_2O_3 , Li_2O_3 y Ta_2O_5 . Los polvos fueron calcinados a 800°C y sinterizados durante dos horas a 1200°C en una atmósfera controlada a través de crisoles sellados.

La difracción de Rayos X (DRX) de ambas muestras, se realizó en un difractómetro de polvos Philips X'pert en configuración de Bragg-Brentano, con radiación de $\text{Cu-K}\alpha 1$ y $\text{Cu-K}\alpha 2$. Las mediciones se realizaron a temperatura ambiente, en un intervalo angular entre 10° y 90° con paso 0.02° , a 30 kV y 16 mA.

La Espectrometría de Energía Dispersada (EDS, por sus siglas en inglés) y Microscopía Electrónica de Barrido (SEM, por sus siglas en inglés) se realizaron en un microscopio JEOL JSM 5300 a temperatura ambiente.

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se determinó el factor de tolerancia de los compuestos BiNN_5 , NaNbO_3 y $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$ para determinar la estabilidad en la estructura cristalina de los sistemas anteriores mencionados [7]. Los valores obtenidos fueron de 0.83, 0.79 y 0.81 respectivamente. Esto implica que las perovskitas tienen estructuras estables, por lo que la sustitución de cationes Bi^{+1} por Na^{+1} en reacción topoquímica puede llevarse a cabo, así como el sistema KNN dopado con litio, lantano y tantalio.

En la figura 3 se muestran los patrones de difracción de rayos X del compuesto obtenido por reacción topoquímica, en diferentes etapas del proceso de lavado. En la figura 3a se muestra el sistema antes de ser lavado, observándose la fase NaNbO_3 (marcada con asterisco) y una segunda fase espuria de Bi metálico (marcada con círculo). En la figura 3b se observa el patrón asociado a una etapa intermedia del proceso de lavado, apreciándose una disminución de la intensidad de los picos asociados a la fase de Bi, lo que sugiere una disminución en su concentración, manteniéndose la presencia

de NaNbO_3 . En la figura 3c se observa el estado final del sistema, después de sucesivas lavadas, donde se aprecian solo reflexiones asociadas a la fase NaNbO_3 . Los procesos de múltiples lavadas aseguran la eliminación de la fase de Bi metálico no deseada en el precursor.

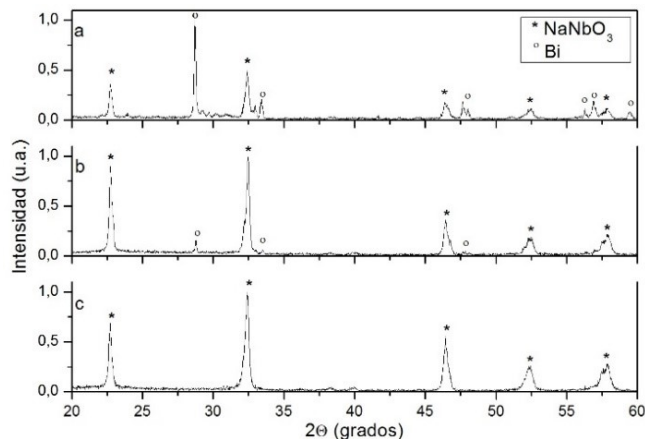


Figura 3. Patrones de difracción de rayos X del sistema: a) antes de las lavadas, b) etapa intermedia y c) después de las lavadas.

En la figura 4 se muestra el patrón de difracción asociado al sistema NaNbO_3 , después el proceso de lavado. Se utilizó el método de Rietveld implementado en el programa FullProf [8], para el refinamiento de la estructura. Se implementó una función tipo Voigt en aproximación de Thompson-Cox-Hasting para ajustar los perfiles de los picos asociados a las reflexiones de Bragg.

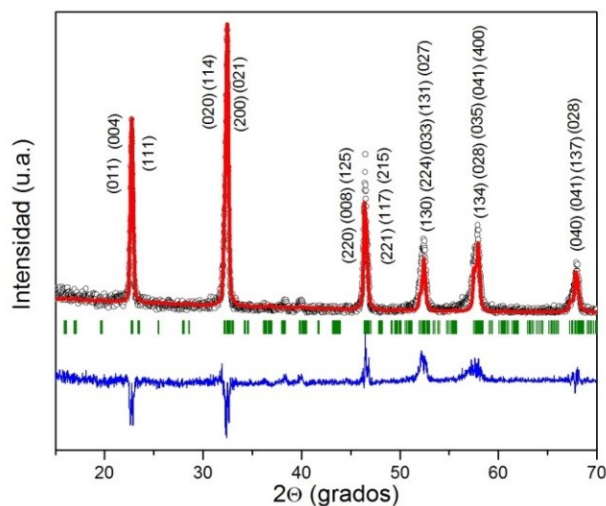


Figura 4. Patrón de difracción correspondiente al sistema NaNbO_3 .

El indexado del patrón se realizó a partir de una fase NaNbO_3 con grupo espacial P221 y parámetros de celda $a = 5,506 \text{ \AA}$, $b = 5,563 \text{ \AA}$ y $c = 15,582 \text{ \AA}$, consistente con la reportada por otros autores [3], y no se identificaron picos adicionales relativos a fases espurias. Los parámetros de bondad de ajuste asociados al proceso de refinamiento muestran una buena concordancia entre los patrones experimental y teórico (%Rp, %Rwp, %Re y χ^2 de 49.6, 49.1, 28.8, 2.909 respectivamente).

En la figura 5 se muestra el patrón de difracción asociado al $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$. También se utilizó el método de Rietveld implementado en el programa FullProf [8], para el refinamiento de la estructura.

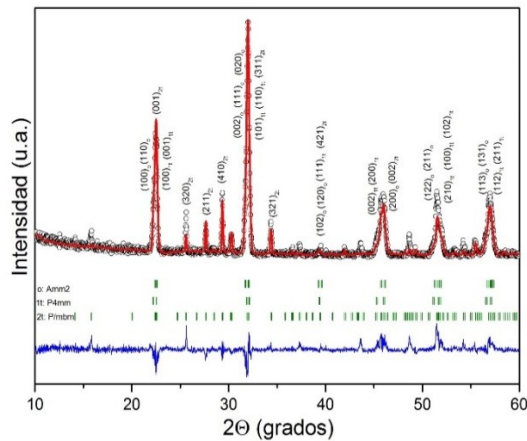


Figura 5. Patrón de difracción correspondiente al sistema $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$.

En el proceso de refinamiento se utilizaron tres fases. La primera una fase ortorrómbica Amm2 (55.33%) con parámetros de la celda $a = 3,936(7)$ Å, $b = 5,583(9)$ Å y $c = 5,642(8)$ Å. La segunda, una fase tetragonal P4mm (22.66%) con parámetros de celda $a = 3,944(8)$ Å, $b = 3,944(8)$ Å y $c = 4,007(1)$ Å. Por último, una tercera fase tetragonal P4/mbm (22.01) con parámetros de la celda $a = 12,545(9)$ Å, $b = 12,545(9)$ Å y $c = 3,944(3)$ Å [3]. Esta se debe a la presencia de una estructura tipo del bronce tungsteno que se forma durante la reacción [9]. En la figura 5 se observa la existencia de un pico en $2\theta = 43,5^\circ$ o que no se pudo ajustar, lo que puede dar como resultado la existencia de una cuarta fase tetragonal P1 que ha sido observada en estructuras $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$ sinterizadas a menores temperaturas [4].

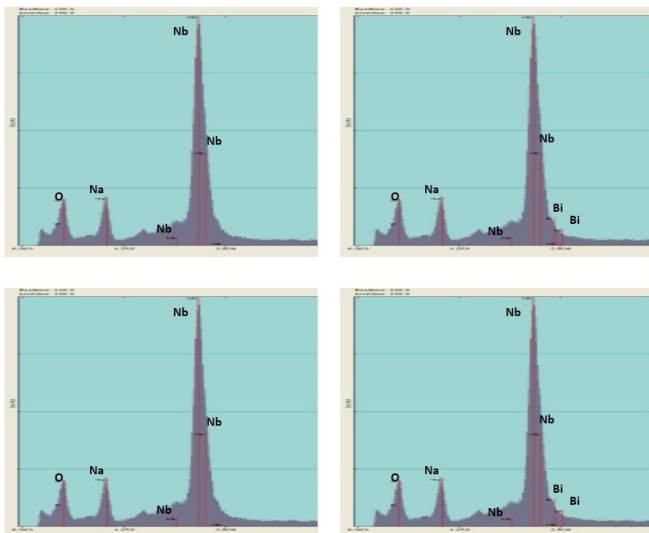


Figura 6. Espectro de EDS del sistema NaNbO_3 a) antes de las lavadas, b) después del proceso de lavado.

Los parámetros de bondad de ajuste asociados al proceso de refinamiento muestran una buena concordancia entre los patrones experimentales y teóricos (%Rp, %Rwp, %Re y χ^2 de 23.9, 29.0, 22.1 y 1.72 respectivamente).

En la figura 6 se muestran los espectros de EDS del sistema antes y después del proceso de lavado. En la figura 6a (antes de las lavadas) se aprecian líneas de emisión correspondiente a elementos de la fase NaNbO_3 y a fases adicionales de bismuto, corroborando los resultados obtenidos por DRX mostrados en la figura 3a. En la figura 6b (después del proceso de lavado), solo se observan las líneas de emisión asociadas al compuesto NaNbO_3 . Esto sugiere que las fases espurias de Bi fueron removidas del compuesto en el proceso de reiteradas lavadas, lo que concuerda con los resultados obtenidos por DRX mostrados en la figura 3c. Estos resultados corroboran que las múltiples lavadas aseguran la eliminación de las fases espurias de Bi no deseada en el precursor.

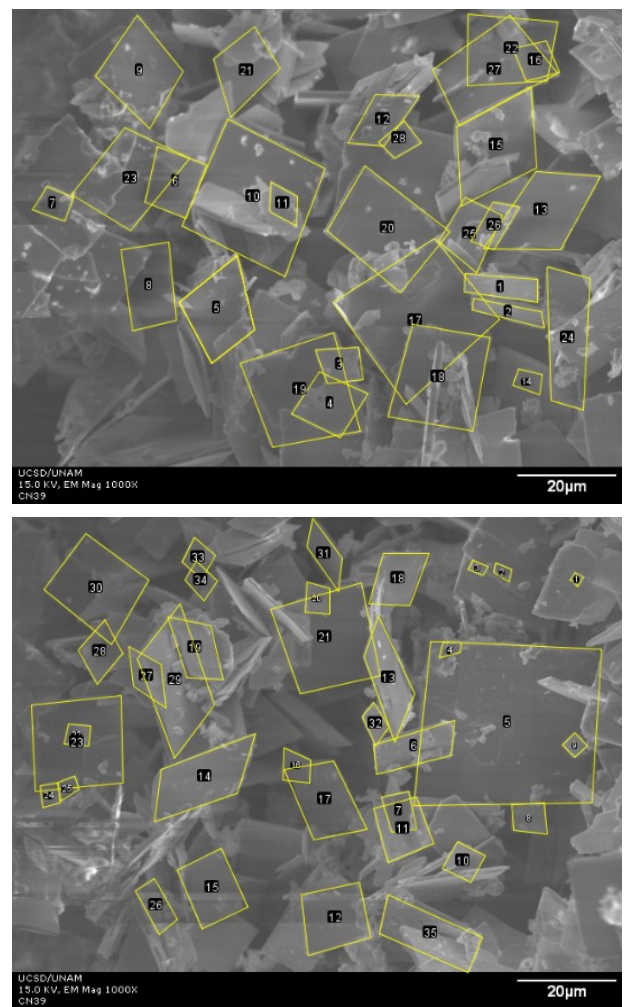


Figura 7. Imágenes de microscopía del sistema NaNbO_3 .

En la figura 7 se presentan las imágenes de SEM tomadas en diferentes puntos de la muestra fracturada de NaNbO_3 . El sistema presenta una morfología de granos en forma de placas de pequeño espesor, sin una forma geométrica predeterminada. Este resultado concuerda con lo reportado en diferentes estudios. [1,3,6].

En la figura 8 se observa una imagen de SEM de fractura de la muestra $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$. El sistema presenta una morfología en forma de poliedros volumétrico y se observan dos tamaños de granos promedios.

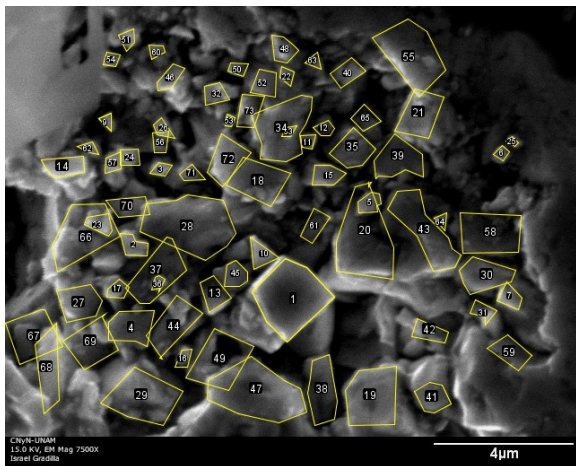


Figura 8. Imágenes de microscopía del sistema $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$.

Se utilizó el software de procesamiento de imagen ImageJ [10] para determinar el tamaño promedio de grano en cada una de las estructuras. En el caso del NaNbO_3 se tomó una forma de grano rectangular como equivalente a la morfología promedio de estos. Se determinó el perímetro y el área de diferentes granos, como se observa en la figura 7, y se calculó la menor y mayor longitud respectivamente.

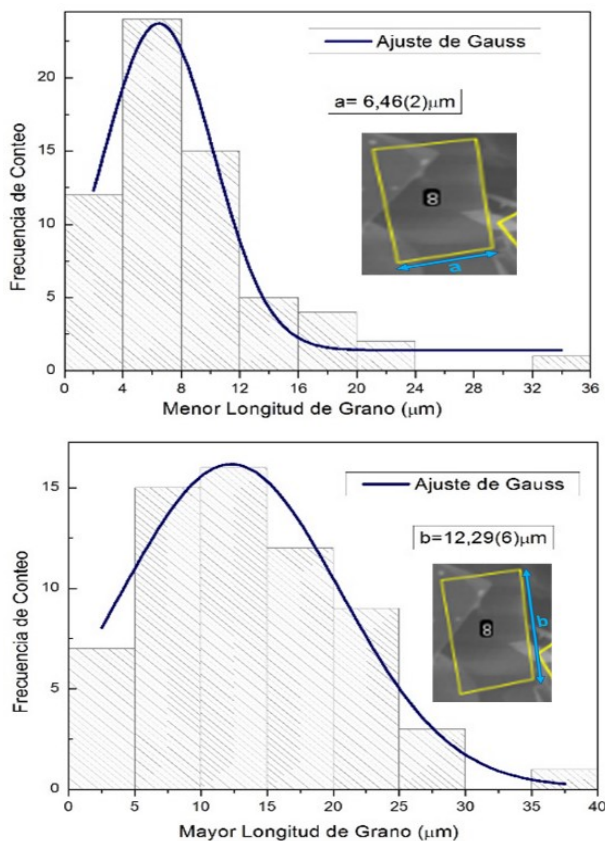


Figura 9. Histogramas asociados a las mediciones de longitud de granos del sistema NaNbO_3 , a partir de las micrografías de la figura 7.

En la figura 10 se observan los histogramas realizados a partir de las longitudes calculadas para cada grano del NaNbO_3 . Se obtuvo una longitud promedio de $a = 6,46(2) \mu\text{m}$ para la menor dirección y $b = 12,29(6) \mu\text{m}$ para la mayor dirección.

En el SEM del $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$ se midieron las áreas de una de las caras de los granos. A partir de estos valores, se calculó el radio del círculo equivalente. Con estos datos, se realizó el histograma de la figura ??.

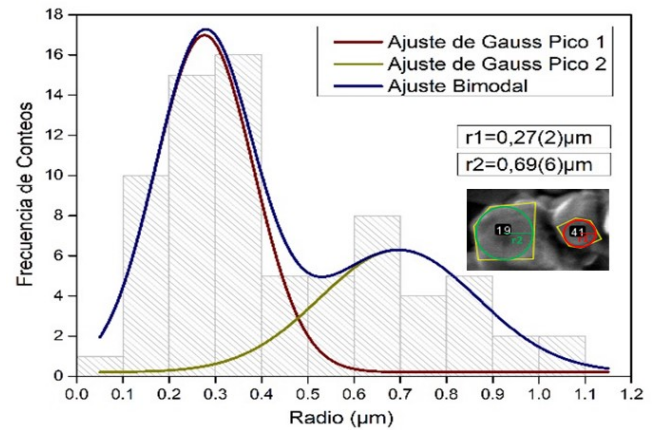


Figura 10. Histograma asociado a las mediciones de los radios de los granos del sistema $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$, a partir de la micrografía de la figura 8.

Se obtuvo una distribución bimodal de tamaños de granos [11]. Los valores promedio de los radios fueron $r_1 = 0,27(2) \mu\text{m}$ y $r_2 = 0,69 \mu\text{m}$.

Se obtuvo un NaNbO_3 con características similares a otros reportados a partir de este método utilizado [1-4, 6]. Sin embargo, en la literatura consultada vemos que los sistemas KNN sin dopar tienen una morfología de granos en formas de cubos muchos más grandes [12]. Esto sugiere que los dopantes utilizados inhiben el crecimiento del grano. En correspondencia con el hecho de que el La^{3+} evita el crecimiento del grano [2-4]. Además, por la distribución bimodal que se obtuvo a partir del SEM y el patrón de difracción del $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$, se puede sugerir que cada tamaño promedio de grano está asociado a una fase.

IV. CONCLUSIONES

A través del método de las sales fundentes, y de una reacción topoquímica, se obtuvo el NaNbO_3 . Los estudios por DRX y EDS mostraron que, mediante sucesivas lavadas, se logró eliminar la fase no deseada de Bi. El NaNbO_3 fue descrito con una fase ortorrómbica. El $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$ presenta una coexistencias de tres fases, ortorrómbica $\text{Amm}2$ (55.33 %), una tetragonal $\text{P}4\text{mm}$ (22.66 %) y otra tetragonal $\text{P}4/\text{mbm}$ (22.01 %) debido a una estructura del tipo bronce tungsteno que se forma durante la reacción. A través de SEM, en el caso del NaNbO_3 , se observó una morfología de granos en forma de placas rectangulares de pequeño espesor. Mientras que en el $\text{KNNLiLaTa}_{0.1}$, la morfología es de granos poliédricos con unas dimensiones mucho menor que las de su precursor y presenta una distribución bimodal debido a la presencia de algunos dopantes como el La.

REFERENCIAS

- [1] Y. Saito, H. Takao, T. Tani, T. Nonoyama, K. Takatori, T. Homma, T. Nagaya, M. Nakamura, *Nature* **432**, 84 (2004).
- [2] J. Portelles, N. Palmero, J. Fuentes, R. López-Noda, O. Raymond Herrera, M. P. Cruz, J. M. Siqueiros, *J. Appl. Phys.* **122**, 234102 (2017).
- [3] J. Portelles, J. Fuentes, J. Gervacio, C. Ostos, O. Raymond, J. Heiras, M. P. Cruz, J. M. Siqueiros, *Ferroelectrics* **534**, 175 (2018).
- [4] J. Fuentes, J. Portelles, A. Pérez, M.D. Durruthy-Rodríguez, C. Ostos, O. Raymond, J. Heiras, M.P. Cruz, J.M. Siqueiros, *Appl. Phys. A* **107**, 733 (2012).
- [5] Vesta v 3.4.0 (2017).
- [6] L. Li, J. Deng, J.Chen, X. Xing, *Chem. Sci.* (2015).
- [7] V. M. Goldschmidt, *Naturwissenschaften* **14**, 477 (1926).
- [8] J. Rodríguez-Carvajal "FULLPROF: A Program for Rietveld Refinement and Pattern Matching Analysis", Abstracts of the Satellite Meeting on Power Diffraction of the XV Congress International Union of Crystallography, Toulouse (1990).
- [9] D. Lin, K. W. Kwok, H. L. W. Chan, *Appl. Phys. A* **91**, 167 (2008).
- [10] ImageJ v 1.8.0-112 (2012).
- [11] D. Chakrabarti, M. Strangwood, C. Davis, *The Minerals, Metals & Materials Society and ASM International* 2009.
- [12] F. Lei, L. Li, L. Yun-rong, Z. Ying-qian, X. Wen-ling, Ch. Yu, *Mat. Res. Bull.* **94**, 506 (2017)

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



THE BETA⁺-DECAY IN PROTON HALO NUCLEUS

LA DESINTEGRACIÓN BETA⁺ EN NÚCLEOS CON HALO DE PROTONES

W. S. HWASH[†]

Department of Physics, Faculty of Education for Pure Sciences, Anbar University, Anbar, Iraq; waleed973@yahoo.com

[†] corresponding author

Recibido 17/6/2021; Aceptado 22/11/2021

The main point of this study is to determine when and where proton emission and β^+ -decay happen. The study focused on three factors, the Coulomb effect, a core deformation, and the clustering configurations. In this work it was used the Microscopic Cluster Model to describe the system. The description of any system that will fragment by clustering forms has been considered in order to expand this methodology to all radioactive nuclei. The results confirmed this logical description and support its use for all radioactive isotopes. The ^{17}Ne has been investigated within this work.

El principal objetivo del estudio ha sido determinar cuándo y dónde ocurren la emisión de protones y la descomposición β^+ en núcleos con halo de protones. El análisis se centra en tres factores: el efecto Coulomb, la deformación del núcleo y las configuraciones de agrupamiento. Este estudio utilizó el modelo de clúster microscópico para caracterizar el sistema. Se ha considerado el uso de formas de agrupamiento en la descripción de cualquier sistema que se fragmentará para expandir esta metodología a todos los núcleos radiactivos. Los resultados confirmaron esta descripción lógica y apoyan que la misma pueda ser utilizada para todos los isótopos radiactivos. En este trabajo se estudia el elemento ^{17}Ne .

PACS: Nucleon distribution and halo features (distribución nucleónica y propiedades de halo), 21.10.Gv, beta-decay (desintegración beta), 23.40.-s; decay by proton emission (desintegración por emisión protónica), 23.50.+z proton emission, nuclear cluster models (modelos nucleares de clúster), 21.60.Gx

I. INTRODUCTION

The progress achieved in the field of nuclear beam radioactivity (within high energies physics) led to a new period in the physics of nuclear structure. The halo property exists in few light proton-rich nuclei like ^{17}Ne . The study of weak binding energies for some exotic nuclei led to the discovery of a halo structure of new light nuclei [1]. This property was detected in the interaction sizes of a cross-section when exotic large radii and proton or neutron r.m.s. radii were noticed in specific light nuclei [2,3].

The proton halo system indicates a proton-rich nucleus which is placed close to the proton-drip line; consequently, this structure is unstable. A valence proton easily can be scattered in the continuum into resonant orbitals of a single-particle. Because of weakly bound energy, the valence protons penetrate the small nuclear centrifugal potential barrier, increasing the radii and forming the halo nuclei.

As a result, the resonant orbitals play an important role in achieving a description of the phenomena of halo in the coupling between continuum and bound states threshold [4,5].

The nuclear beams with low, medium, and high energies are named radioactive nuclear beams; those beams allow the discovery of many halo nuclei. The features of those nuclei are studied by the particle fragmentation method in reactions of high and intermediate energies. These properties are diverse from the nuclear-known structures near or at the β -stability line, denoting halo proton structures. So far, only 3–4 proton-halo nuclei were recognized experimentally, but several atomic nuclei are proposed as possible candidates.

The two-proton halo nucleus Neon-17 is considered as a good candidate for investigating the presence of two valence protons in the halo structure due to the Borromean property and loosely separation energy of $^{17}\text{Ne}(S_{2p} = 0,94 \text{ MeV})$. In the literature it is reported that the large cross-section of Neon-17 is related to the interaction cross-section for the $A = 17$ isobaric, which means that it has a halo structure [6]. A large asymmetry of β -decay was also noticed for this atomic nucleus [7]. Both observations showed the halo structure; however, the observations must be totally understood. Theoretically, β -decay is explained by low admixture s-wave possibility for two valence nucleons of ^{17}Ne , collected with a d-wave possibility [8]: no halo was proposed. Studies suggested no halo shape according to the Coulomb energy [9]. Some studies point to a big probability of the valence protons s-wave [10,11].

The ^{17}Ne nucleus has been investigated by using Jacobi coordinates. The Jacobi coordinates system is good to describe such as halo structure as shown in figure 1. The ^{17}Ne has Borromean property, so this system has been described in T-configuration within Jacobi coordinates. The angle in the figure defines an angle of halo proton motion around the core.

The Borromean property and weak separation energy $S_{2p} = 0,94 \text{ MeV}$ of the ^{17}Ne nucleus, is a significant candidate for investigating a probable protons halo. Several experimental works (the calculation of cross-section) proposed the halo property for $A = 17$ isobars [6]. The β -decay noticed between Neon-17 (^{17}Ne) and Nitrogen (^{17}N) is indicative of an abnormal orbital for the halo protons in ^{17}Ne [7]. The measurements of a cross-section at intermediate energies have suggested that a halo is not present in ^{17}Ne [12]. Some theoretical investigations displayed contradiction on protons

occupying dominance of the 1d5/2 orbital, taking Coulomb energy into consideration [9]. The study of the β -decay reached a similar conclusion for a d-wave. The probability of a proton halo structure in (Neon-17) is taken into consideration from Glauber with Hartree–Fock in Ref. [13]. Also, a calculation has suggested the two valence protons halo β^+ -decay and proton emission for ^{17}Ne , based on the Faddeev model [10, 14].

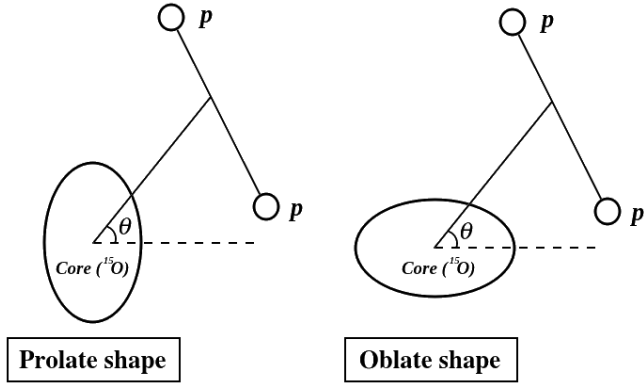


Figure 1. Jacobi coordinates for three-body system with two shapes of the core and angle of two halo protons.

The Hamiltonian of ^{15}O is,

$$\hat{h}_{core}(\xi_{core})\phi_{core}(\xi_{core}) = \varepsilon_{core}\phi_{core}(\xi_{core})$$

, and total wavefunction is,

$$\Psi^{JM}(x, y, \xi) = \phi_{core}(\xi_{core})\psi(x, y)$$

The wavefunction of the valence protons is,

$$\psi_{n,k}^{l_x, l_y}(\rho, \theta) = R_n(\rho)\psi_k^{l_x, l_y}(\theta).$$

The total Hamiltonian \hat{H} is,

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{h}_{core}(\vec{\xi}) + \hat{V}_{core-n1}(r_{core-n1}, \vec{\xi}) + \hat{V}_{core-n2}(r_{core-n2}, \vec{\xi}) + \hat{V}_{n-n}(r_{n-n}) + V_c,$$

where

$$\hat{V}_{core-n}(r_{core-n}, \vec{\xi}) = \frac{-V_0}{\left[1 + \exp\left(\frac{r_{core-n} - R(\theta, \phi)}{a}\right)\right]} - \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \times (2l.s) \frac{V_{s,0}}{4r_{core-n}} \frac{d}{dr_{core-n}} \left(\left[1 + \exp\left(\frac{r_{core-n} - R_{s0}}{a_{s0}}\right)\right]^{-1} \right),$$

and

$$\hat{V}_{n-n}(r_{n-n}) = -\frac{\hbar^2}{m^2 c^2} (2l.s) \frac{V_{s,0}}{4r_{n-n}} \frac{d}{dr_{n-n}} \left(\left[1 + \exp\left(\frac{r_{n-n} - R_{s0}}{a_{s0}}\right)\right]^{-1} \right),$$

with

$$R = R_0[1 + \beta_2 Y_{20}(\theta, \phi)], \quad Y_{20}(\theta, \phi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1). \quad (7)$$

More details about this formalism are in [15–19].

II. RESULTS

The β^+ -decay and proton emission are important in nuclear radioactivity and its applications. The knowledge of when and where β^+ -decay and proton emission take place in nuclei is very significant. The present study has focused on this matter. The ^{17}Ne is a radio nucleus and has a half-life of around 109.2(5) ms. The decay probabilities of ^{17}Ne are β^+ , p (96.0%), β^+ , α (2.7%) and β^+ (1.3%). The dominant probability is β^+ , p (96.0%), which we have considered in the present work. The ^{17}Ne has two protons away from the other nucleons that are the reason for proton emission and the decay. In the ^{17}Ne , the two valence protons surround the ^{15}O and move around the probably deformed core (^{15}O). The Hamiltonian of the ^{17}Ne structure relied on the microscopic core and the valence protons clusterization. The configuration and the clusterization of the system depended on several factors; the (θ) of valence proton position is one of them. The energy of the clustered valence protons is calculated based on Eq. 6, taking into consideration the Coulomb effect.

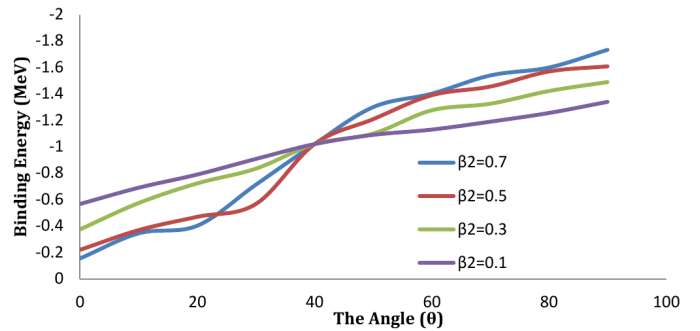


Figure 2. The Binding energy of the valence neutrons as function of the angle with prolate shape.

Eq.3 describes the valence protons wavefunction, whereas ϕ_{core} in eq. 2, defines the wavefunction of the core described by the shell model. Therefore the valence protons wave function depends on the angle as seen in eq. 3.

Table 1. The binding energy and angle of valence electrons, and prolate deformation parameters of ^{15}O .

θ	Binding Energy (MeV)			
	$\beta_2=0.7$	$\beta_2=0.5$	$\beta_2=0.3$	$\beta_2=0.1$
0	-0.1547	-0.22	-0.375	-0.567
10	-0.345	-0.369	-0.574	-0.69
20	-0.4023	-0.47	-0.723	-0.79
30	-0.713	-0.567	-0.8345	-0.908
40	-1.02	-1.02	-1.02	-1.02
50	-1.3	-1.209	-1.1	-1.09
60	-1.402	-1.39	-1.276	-1.13
70	-1.54	-1.456	-1.326	-1.19
80	-1.6	-1.57	-1.422	-1.256
90	-1.734	-1.609	-1.49	-1.34

Movement of the valence protons around the ^{15}O makes the energy of these protons to vary regarding the deformation

shape (oblate or prolate) and also the angle (θ). In fig. 2, it is shown how the energy varies from -0.1547 MeV to -1.734 MeV for $\beta_2 = 0,7$, from -0.22 MeV to -1.609 MeV for $\beta_2 = 0,5$, from -0.375 MeV to -1.422 MeV for $\beta_2 = 0,3$ and from -0.567 MeV to -1.256 MeV for $\beta_2 = 0,1$ with angle values from 0° to 90° as they are listed in the table 1.

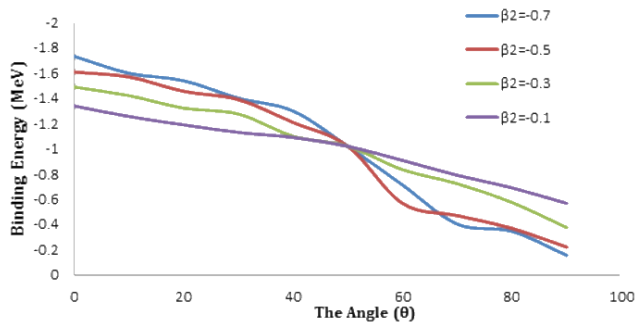


Figure 3. The Binding energy of the valence neutrons as function of the angle with oblate shape.

In fig. 3, it is shown how the energy varies from -1.734 MeV to -0.1547 MeV for $\beta_2 = -0,7$, from -1.609 MeV to -0.22 MeV for $\beta_2 = -0,5$, from -1.422 MeV to -0.375 MeV for $\beta_2 = -0,3$ and from -1.256 MeV to -0.567 MeV for $\beta_2 = -0,1$ with angle values from 0° to 90° as they are listed in the table 2.

Table 2. The binding energy and angle of valence electrons, and prolate deformation parameters of ^1_5O .

θ	Binding Energy (MeV)			
	$\beta_2=-0.7$	$\beta_2=-0.5$	$\beta_2=-0.3$	$\beta_2=-0.1$
0	-1.734	-1.609	-1.49	-1.34
10	-1.6	-1.57	-1.422	-1.256
20	-1.54	-1.456	-1.3226	-1.19
30	-1.402	-1.39	-1.276	-1.13
40	-1.3	-1.209	-1.1	-1.09
50	-1.02	-1.02	-1.02	-1.02
60	-0.713	-0.567	-0.8345	-0.908
70	-0.4023	-0.47	-0.723	-0.79
80	-0.345	-0.369	-0.574	-0.69
90	-0.1547	-0.22	-0.375	-0.567

In figure 2, the core has been considered prolate with parameter of deformation β_2 (0,7, 0,5, 0,3, and 0,1). According to the shell model structure, the core of ^1_5O has five neutrons outside the first shell and closed shell for proton with magic number 8. The majority effect of quadrupole comes from atomic number (charged particles) and minority role from neutron number because the neutrons have a negative moment.

So the quadrupole and deformation of ^{15}O is expected to be very little. The total quadrupole moment of the ^{17}Ne nucleus can write as $Q = Q_j + Q_c$, where the Q_j is the contribution coming from the two protons and Q_c is the quadrupole of the core. Normally $Q_c \gg Q_j$ [20] where,

$$Q = Q' \frac{J}{2J+3} \left[\frac{3\Omega}{J(J+1)-1} \right] \text{ and } Q' = \frac{4}{5} \delta Z R^2.$$

The δ is associated with the deformation parameter β_2 ($\beta_2 = 2/3(4\pi/5)^{1/2}\delta$) [20].

From the atomic number ($Z = 8$) and concept of the magic number, we assume the deformation parameter about 0,0 to -0,1 if it is oblate and about 0,0 to -0,1 if it is prolate.

The method used in this work depends on the Coulomb effect, the atomic number, the total angular momentum and the cluster angle of the two protons with the parent. All probable deformations and clusterization angle channels were investigated. The deformation of the ^1_5O is the starting point. The various energies of the protons regarding relative movement were calculated by using a virtual description, as shown in figures. Using a deformed ground state of the parent nucleus makes all configurations probable, which is acceptable theoretically. The acceptable deformation parameters that have been considered as an alternative of experimental data, are modified by the degree of spatial freedom of this investigation: if only experimental data are used, some probable channels cannot be opened due to lack of deformation parameter values for one or two of the clusters. An emission of radioactivity (or proton emission) can be assumed from the figures, depending on a pure cluster configuration. Always remember that "forbidden states" in the theoretical study analysis must mean bound states. We should assume that the low-lying cluster configuration of prolate nucleus doesn't refer to the pole-to-pole.

The description of the cluster configuration is very interesting as a good starting point of decay and proton emission as in the channel of a binary proton emission. Actually, the shapes of pole-pole have been chosen by penetrability calculation referred to ban the exclusion Pauli principle. Therefore, they can be small compounds only in the fundamental state of this nucleus. The calculation has addressed the allowed clusterization shapes, which are related to the valence protons. The deformation of the ground state has been considered and has an effect on the clusters of the core and protons, even when it is very small, as it is shown in the results.

An interesting question is, does the Halo clusterization atomic nuclei happen in other radioactivity isotopes just before the decay starting? The clusterization is expected for radio nuclei at excited states near the relative proton emission and β^+ -decays. Essentially, the important point of this work is to determine where and when the proton emission and the decay starting take place. The location of the valence protons to emission or decay is the goal. The results appointed the starting of emission and decay according to energies. The nucleon distributions and the sizes of nuclei give us significant evidence related to a weak or a strong interaction and decay. Also, the key idea of the current work is to drive the Halo structure and clusterization of protons and neutrons to other radioactive isotopes. Those nuclei, which have radioactivity, can be dealt with in a clusterization structure. From the results and according to the core structure has been driven by the Shell model, the deformation parameter $\beta_2 = 0,7, 0,5, 0,3, -0,7, -0,5$, and $-0,3$ have been excluded. The available evidence value of the deformation parameter is referring to the oblate shape for the ^1_5O [21]. By normalization, the theoretical value of

deformation shape is used to get the energy value, which is (-0.567 MeV).

III. CONCLUSIONS

In the present work, the two proton halo ^{17}Ne nucleus has been investigated to calculate the position of the valence protons in emission or decay. The study depended on the Microscopic Cluster Model. The advantage of this model is to drive the core with more degrees of freedom. The Coulomb effect has been taken into consideration. The clusterization configurations and the deformation of the core have played an important role in the processes of proton emission and β^+ -decay. All three factors: the Coulomb interaction, the core deformation and the clusterization have a large impact on the fragmentation of the parent nucleus. But the main responsible of a starting point for emission or decay is the clusterization configuration, because it appointed the decay and emission positions of the valence protons. The results are correlated to two factors: one built on the cluster angle and the second on the core degrees of freedom, even when its deformation is small. The motion of the valence protons around the ^{15}O showed different energies depending on the angles. So, we can appoint the position of the valence proton to decay or to emission. We strongly believe that the present method can be applied to all radioactive nuclei in order to determine the energies and the proton position of decay.

REFERENCES

- [1] I. Tanihata, H. Hamagaki, O. Hashimoto, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **55**, 2676 (1985).
- [2] I. Tanihata, Prog. Part. Nucl. Phys. **35**, 505 (1995).
- [3] P. G. Hansen, A. S. Jensen and B. Jonson, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **45**, 591 (1995).
- [4] J. Marganec, *et al.*, Phys. Lett. B **759**, 200 (2016).
- [5] J. Dobaczewski, H. Flocard, J. Treiner, Nucl. Phys. A **422**, 103 (1984).
- [6] A. Ozawa *et al.*, Phys. Lett. B **334**, 18 (1994).
- [7] A. Ozawa *et al.*, J. Phys. G **24**, 143 (1998).
- [8] J. D. Millener, Phys. Rev. C **55**, R1633 (1997).
- [9] H. T. Fortune, R. Sherr, Phys. Lett. B **503**, 70 (2001).
- [10] L. V. Grigorenko *et al.*, Nucl. Phys. A **11**, 372 (2003).
- [11] R. Kanungo, Nucl. Phys. A **734**, 337 (2004).
- [12] R. E. Warner, *et al.*, Nucl. Phys. A **635**, 292 (1998).
- [13] H. Kitagawa, N. Tajima, H. Sagawa, Z. Phys. A **358**, 381 (1997).
- [14] M. V. Zhukov, I. J. Thompson, Phys. Rev. C **52**, 3505 (1995).
- [15] F. M. Nunes, J. A. Christley, I. J. Thompson, R. C. Johnson, V. D. Efros, Nucl. Phys. A **609**, 43 (1996).
- [16] T. Tarutina, I. J. Thompson, Nucl. Phys. A **733**, 53 (2004).
- [17] W. S. Hwash, R. Yahaya, S. Radiman, A. F. Ismail, J. Korean Phys. Soc. **61**, 27 (2012).
- [18] W. S. Hwash, R. Yahaya, S. Radiman, A. F. Ismail, Int. J. Mod. Phys. E **21**, 1250066 (2012).
- [19] W. S. Hwash, R. Yahaya, S. Radiman, Phys. Atom. Nuclei **77**, 275 (2014).
- [20] William E. Hornyak, Nuclear Structure, 1st Ed. (Academic Press, New York, 1975).
- [21] W. S. Hwash, Int. J. Mod. Phys. E **25**, 1650105 (2016).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



AMPLIACIÓN DE LAS POSIBILIDADES DEL SISTEMA HPCI-1 PARA EL ESTUDIO DEL MOVIMIENTO DE UN PÉNDULO SIMPLE REAL EN OSCILACIONES PEQUEÑAS

EXPANDING THE POSSIBILITIES OF THE HPCI-1 SYSTEM FOR THE STUDY OF A REAL SIMPLE PENDULUM IN SMALL OSCILLATIONS

A. HERNÁNDEZ-FEREIRA[†]

Departamento de Física Facultad de Ingeniería, Universidad de Cienfuegos, Cuba; archdez@ucf.edu.cu[†]

[†] autor para la correspondencia

Recibido 1/2/2021; Aceptado 15/11/2021

Empleando las posibilidades del experimento “Isocronismo del péndulo simple” del laboratorio de Física asistido por computadora HPCI-1 se obtuvieron los registros de las variaciones del voltaje eléctrico con el tiempo correspondientes a las posiciones angulares de los cuerpos integrantes de tres péndulos simples reales de diferentes masas que ejecutaban oscilaciones pequeñas. Usando la herramienta Analyze del HPCI-1 se obtuvieron los valores de las amplitudes en los diferentes instantes de tiempo que luego se procesaron empleando EXCEL. Así, se realizó un estudio de las oscilaciones amortiguadas de este sistema. Con la variante empleada, el trabajo de laboratorio va más allá del estudio tradicional restringido a las oscilaciones armónicas sin presencia de fuerzas de fricción, situación que no se corresponde con la del péndulo real. En particular se obtuvieron los coeficientes de amortiguamiento de las esferas para el aire y se evidenció la influencia de la masa de los cuerpos en el mismo, también se mostró su influencia en la amplitud y frecuencia de oscilación.

Using the possibilities of experiment “Isochronism of Simple Pendulum” of the Computer Aided Physics Laboratory HPCI-1, the records of the variations of the electric voltage with time corresponding to the angular positions of the integrating bodies of three simple pendula in small oscillations with different masses were obtained. Applying the Analyze tool of the HPCI-1 the values of the amplitudes in the different instants of time were obtained and later processed using EXCEL. In this way, a general study of the damped oscillations of this system was carried out. Thanks to the proposal, the laboratory work goes beyond the traditional study restricted to harmonic oscillations without the presence of friction forces, which does not match real pendula. In particular, the damping coefficients of the spheres due to the air were obtained and the influence of the mass of the bodies on them was evidenced, their influence in amplitude and frequency of oscillations was also shown.

PACS: Teaching methods and strategies (métodos y estrategias de enseñanza), 01.40.gb; laboratory computer use (uso de computadores en el laboratorio), 01.50.Lc; data acquisition: hardware and software (adquisición de datos), 07.05.Fb; laboratory experiments and apparatus (aparatos y experimentos de laboratorio), 01.50.Pa

I. INTRODUCCIÓN

En la inmensa mayoría de los cursos de Física General de la Educación Media y de la Educación Superior, exceptuando los de las carreras de Física, se aborda el estudio del péndulo simple en el caso estrictamente armónico, en que no se consideran los efectos de la fuerza de fricción del cuerpo con el medio en el cual se mueve y se reducen sus oscilaciones a ángulos pequeños (aquellos para los cuales $\sin \theta \sim \theta$). Al estudio del caso cuando las oscilaciones no son pequeñas y no se considera la fricción se han dedicado infinidad de trabajos que aparecen reportados en la literatura [1–7]. Sin embargo, son más escasos los que considerando las oscilaciones pequeñas toman en cuenta los efectos de la fricción [8]. Para otros sistemas, como el cuerpo resorte, hay algunos reportes.

Entre los experimentos previstos en el Sistema de Prácticas de Laboratorio de Física Asistido por Computadora (SPLAC) HPCI-1 de la firma Star Sensor Ltd en la sección 2 Oscilaciones y Ondas aparece el experimento 1 titulado “Isocronismo del péndulo simple” (ver figura 1).

El mismo está dedicado a ilustrar que un péndulo real mantiene constante tanto la amplitud de sus oscilaciones como el período las mismas para una longitud dada. Para ello usa el registro eléctrico de las oscilaciones de un péndulo con una esfera pesada en un intervalo de tiempo muy pequeño que tiene el aspecto mostrado en la figura 2.

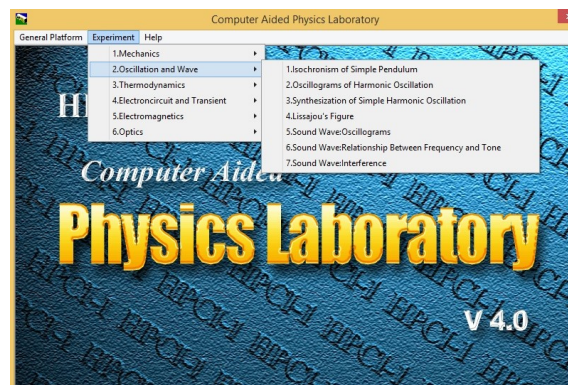


Figura 1. Aspecto de la pantalla del menú principal del software del SPLAC HPCI-1 mostrando los experimentos del capítulo 2 donde aparece el 1 que fue usado en el presente trabajo.

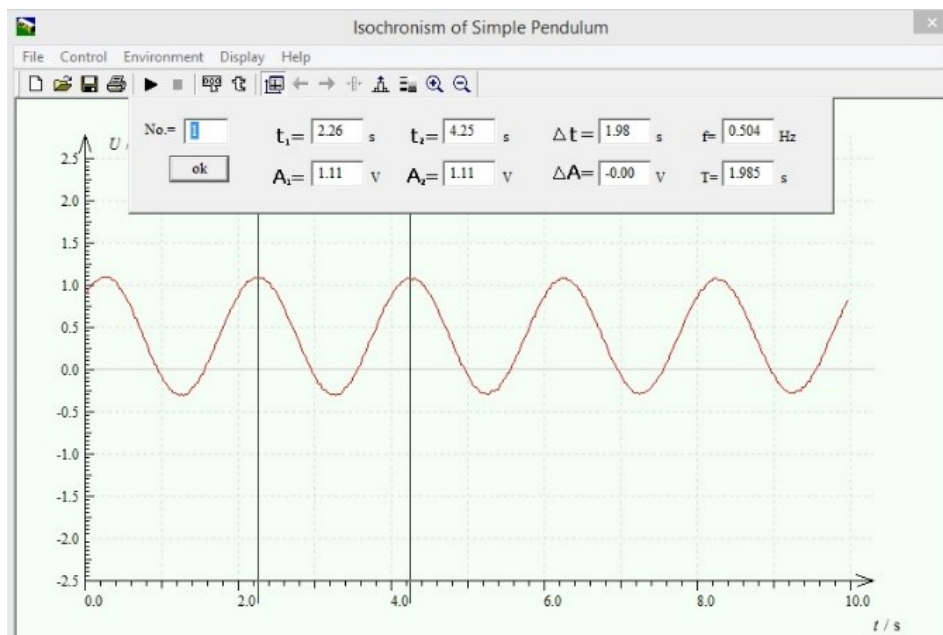


Figura 2. Aspecto de la pantalla del experimento usado que muestra las amplitudes de las oscilaciones en dos instantes de tiempo separados por un período para el péndulo con esfera de acero en un intervalo de 10 s.

En dicha figura aparece la herramienta Analyze del sistema HPCI-1 que sirve para medir la amplitud de las oscilaciones en dos instantes de tiempo y brinda sus diferencias. Como podemos apreciar no hay variación ΔA de la amplitud en un período en estas condiciones muy particulares.

Como sabemos, estas cuestiones no son estrictamente ciertas bajo cualesquiera circunstancias y viene a reiterar un resultado que se plantea en la Enseñanza Media y que puede ser objeto de un análisis más profundo a la luz de los conocimientos de Matemática Superior que adquieren los estudiantes universitarios de las carreras de Ciencia e Ingeniería. Este es un ejemplo típico del uso limitado de una tecnología como lo son los SPLAC para comunicar un resultado que no es estrictamente cierto y sin embargo no se emplean sus potencialidades para profundizar y revelar los verdaderos detalles del fenómeno o sistema físico estudiado.

El propósito del presente trabajo es mostrar que con el software de un experimento del HPCI-1, de alcance muy limitado, se pueden evidenciar los efectos de la fuerza de fricción en un péndulo simple real que ejecuta oscilaciones pequeñas y que por tanto no puede considerarse armónico ya que es amortiguado. Para ello hacemos uso del registro eléctrico de las oscilaciones del mismo y procesamos la información de dichos registros para mostrar las características del movimiento amortiguado y extraer parámetros importantes que lo describen.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

Se empleó el montaje con los accesorios del trabajo de laboratorio 1 de la sección de Oscilaciones y Ondas titulado "Isocronismo del péndulo simple" que aparece entre los trabajos del sistema de prácticas de laboratorio de Física asistido por computadora HPCI-1 de la firma Star Sensor Ltd [9, 10]. En la figura 3 aparece un esquema del mismo y

del soporte donde se colocaba el péndulo.

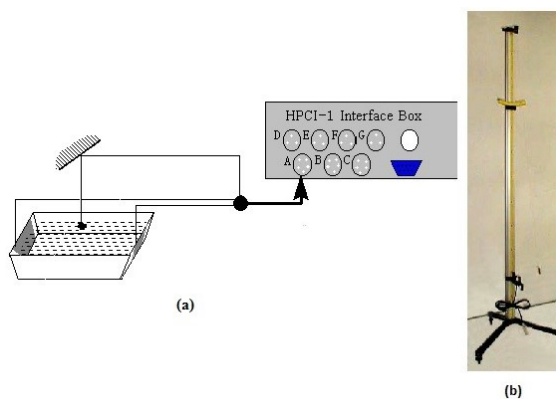


Figura 3. (a) Esquema del montaje (b) Soporte para colocar los péndulos.

En este experimento se emplea el sensor de voltaje A con tres terminales, dos de los cuales sensaban la diferencia de potencial entre los electrodos. Un tercer terminal sensaba la diferencia de potencial respecto al valor correspondiente al centro de la cubeta de una aguja metálica colocada en el extremo de la esfera que, en contacto con el agua, oscilaba entre los electrodos. La fuerza de fricción debida al movimiento del extremo de la aguja de muy poca sección y profundidad en el agua (apenas 1 mm² de sección transversal de interacción) es considerablemente menor que la que se origina por el movimiento de la esfera en el aire con una sección transversal de 283.58 mm². Es por ello que se puede atribuir la atenuación de la amplitud de las oscilaciones fundamentalmente a la fuerza de fricción viscosa entre la esfera y el aire. La observación de la figura 2 para una esfera de acero moviéndose en el aire y la aguja en el agua demuestra lo aceptable de la anterior suposición.

Los resultados de un trabajo previo [11] ya mostraban

evidencia experimental de la influencia de la masa de la lenteja del péndulo en su comportamiento durante el movimiento amortiguado que ejecutaba. Ahora esto se quería evidenciar mostrando, mediante un dispositivo de registro eléctrico, el cambio de sus amplitudes en el tiempo. Para ello se emplearon tres esferas de igual diámetro (19 mm) pero de diferentes materiales y masas. La figura 4 muestra los detalles de las agujas insertadas en las esferas y la 5 la cubeta con la ranura y los electrodos.



Figura 4. Foto mostrando los detalles de las esferas con agujas.



Figura 5. Foto mostrando la cubeta empleada.

Variando la distancia desde donde se colgaba el péndulo se obtenían diferentes valores de su longitud. En calidad de hilo se usaba un alambre fino de cobre ensartado en el ojo de la aguja. El soporte tenía la posibilidad de nivelación con tres tornillos en sus patas para garantizar el movimiento de oscilación del cuerpo en un plano.

La esfera oscilaba siempre a la misma altura a lo largo de una ranura de la cubeta cilíndrica especialmente diseñada con dos electrodos circulares de cobre y que contenía agua. Los detalles se muestran en la figura 6(a) y en la 6(b) se muestra la instalación en su conjunto.

Al aplicar una diferencia de potencial a los dos electrodos (con ayuda de una fuente de CD) en el volumen de agua entre ambos se establece un campo eléctrico de magnitud E relativamente uniforme y la diferencia de potencial entre el

punto donde se localiza la aguja y el centro de la cubeta varía de forma lineal con la posición lineal o angular al mismo en la forma:

$$V[x(t)] - V(0) = E \cdot x(t) = El\theta(t). \quad (1)$$

Aquí l es la longitud del péndulo. Este resultado se puede obtener de la relación entre el potencial y el campo eléctrico y aparece en cualquier libro de texto de los cursos de Física [12,13].

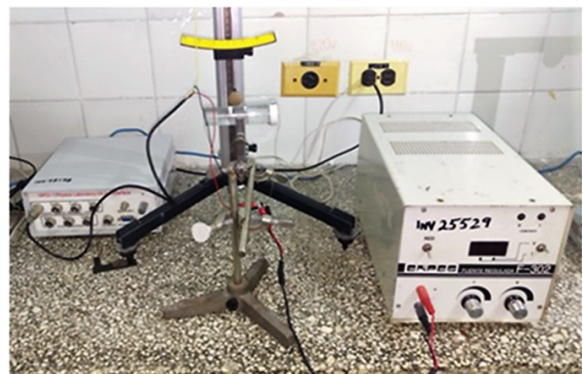
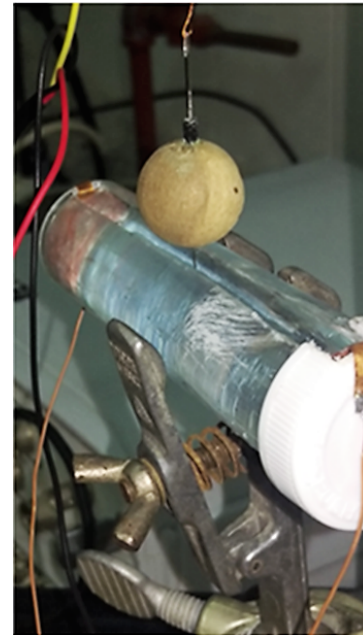


Figura 6. (a) Foto mostrando los detalles de la esfera con aguja oscilando a través de la ranura de la cubeta. (b) Foto mostrando el montaje en su conjunto.

Así, la anteriormente mencionada diferencia de potencial está directamente relacionada con la elongación de las oscilaciones. Ejecutando el software asociado con este trabajo se pudieron obtener los registros de dichas diferencias de potencial correspondientes a las elongaciones angulares de los tres péndulos. Los registros se hicieron para diferentes intervalos de tiempo de las oscilaciones, para 10 s, para 25 s y para 90 s. En las figuras 6, 7 y 8 se muestra el aspecto de estos registros para diferentes intervalos de tiempo.

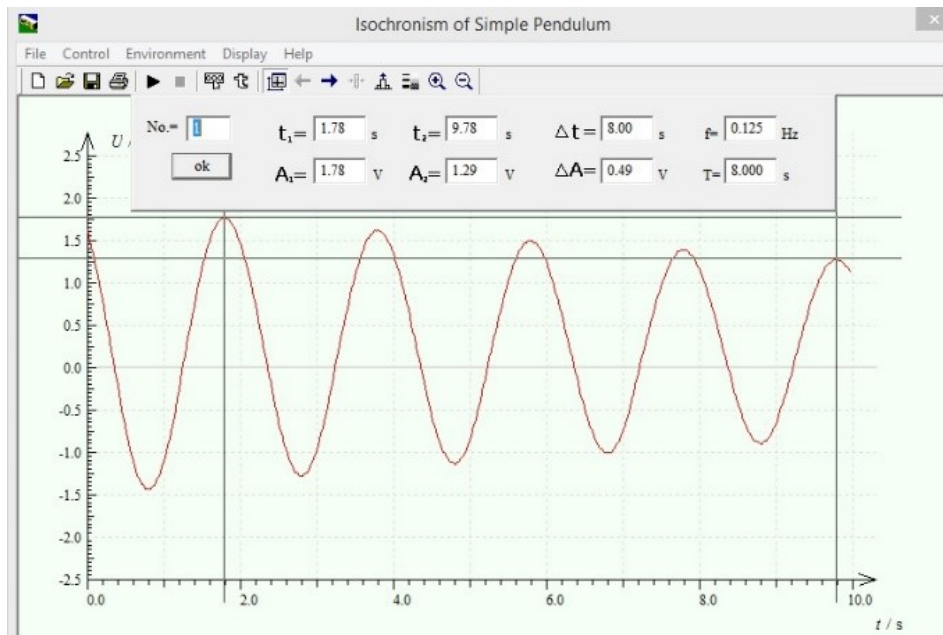


Figura 7. Gráfica del registro del voltaje en función del tiempo para el péndulo con esfera de madera en un intervalo de 10 s mostrando los valores de la herramienta Analyze para dos instantes de tiempo separados por 4 períodos.

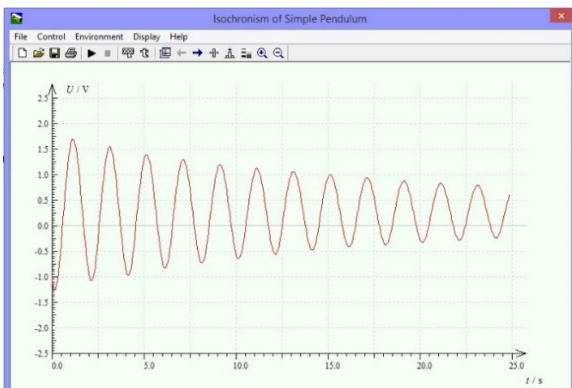


Figura 8. Gráfica de registro del voltaje en función del tiempo para el péndulo con esfera de madera en un intervalo de 25 s.

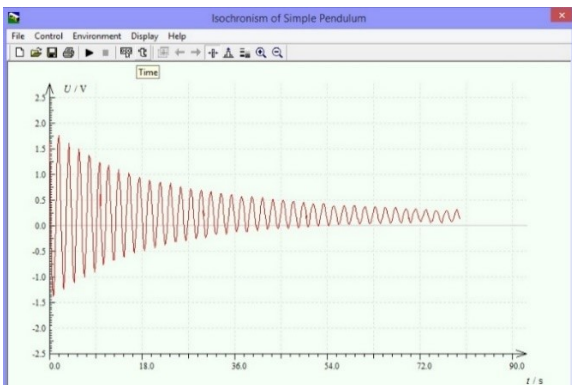


Figura 9. Gráfica del registro del voltaje en función del tiempo para el péndulo con esfera de madera en un intervalo de 90 s.

Una vez obtenidos los registros se hizo uso de la herramienta Analyze del HPCI-1 con la cual se pueden obtener, de las gráficas del voltaje en función del tiempo, los valores del mismo para dos instantes de tiempo diferentes. Estos valores se corresponden con los de la elongación angular. En este caso

se midieron los valores del voltaje en los puntos de máxima elongación, de esta manera la diferencia entre dos instantes de tiempo correspondientes a dos máximos consecutivos era igual al período de oscilación de dicho péndulo.

En las figuras 6 y 9 se muestra el aspecto de la pantalla correspondiente a la medición del voltaje con el Analyze en dos instantes de tiempo separados por 4 períodos para los péndulos con esfera de madera y de aluminio respectivamente. Los pares de valores (amplitud, tiempo) para los tres péndulos se registraron y se construyeron las tablas similares a la tabla 1 para luego procesarlos empleando EXCEL de Microsoft.

Se construyeron las gráficas del voltaje $V(t)$ contra el tiempo t y del logaritmo del voltaje $\ln V(t)$ contra el tiempo t . La primera se ajustó de acuerdo a una ley exponencial y la segunda de acuerdo a una dependencia lineal. En ambos casos EXCEL brinda las ecuaciones de ajuste y el valor del parámetro R^2 que caracteriza el grado de correspondencia con las funciones de ajuste. Para la gráfica $\ln V(t)$ contra el tiempo se obtuvieron las ecuaciones de las rectas de ajuste y de ellas los valores de la pendiente m , el intercepto b y el parámetro R^2 que nos indicaba el grado de linealidad.

A su vez, se calcularon las incertidumbres Δm en la pendiente y Δb en el intercepto de los parámetros de la recta de ajuste de acuerdo con las expresiones:

$$\Delta m = S_y \sqrt{\frac{N}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2}} \quad (2)$$

$$\Delta b = S_y \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N x_i^2}{N \sum_{i=1}^N x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2}} \quad (3)$$

Donde S_y viene dada por:

$$S_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - mx_i - b)^2}{N - 2}}. \quad (4)$$

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La observación de las gráficas como las mostradas anteriormente evidenciaron que el movimiento de los péndulos en todos los casos era infra (o sub) amortiguado.

Admitiendo que la fuerza de fricción entre la esfera y el aire circundante donde se mueve es del tipo viscosa que puede ser descrita en la forma $f = -bv$ la ecuación diferencial que describe el movimiento es:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{b}{m} \frac{d\theta}{dt} + \frac{g}{L} \theta = 0, \quad (5)$$

cuya solución viene dada por:

$$\theta(t) = \theta_{max} e^{-\frac{b}{2m}t} \cos(\omega t + \varphi_0), \quad (6)$$

donde la frecuencia angular ω de las oscilaciones es:

$$\omega = \sqrt{\frac{g}{L} - \frac{b^2}{4m^2}}. \quad (7)$$

La ecuación 6 indica que la amplitud de las oscilaciones decae exponencialmente con el tiempo y que el parámetro $\gamma = b/2m$ determina la rapidez de la atenuación que tiene lugar. Así mismo, la ecuación 7 indica que $\gamma^2 = b^2/4m^2$ determina el corrimiento de la frecuencia angular respecto al valor de la misma para el caso estrictamente armónico (sin fricción). Es por ello que la obtención de este parámetro γ denominado coeficiente de amortiguamiento es importante y en su determinación se enfocó el trabajo.

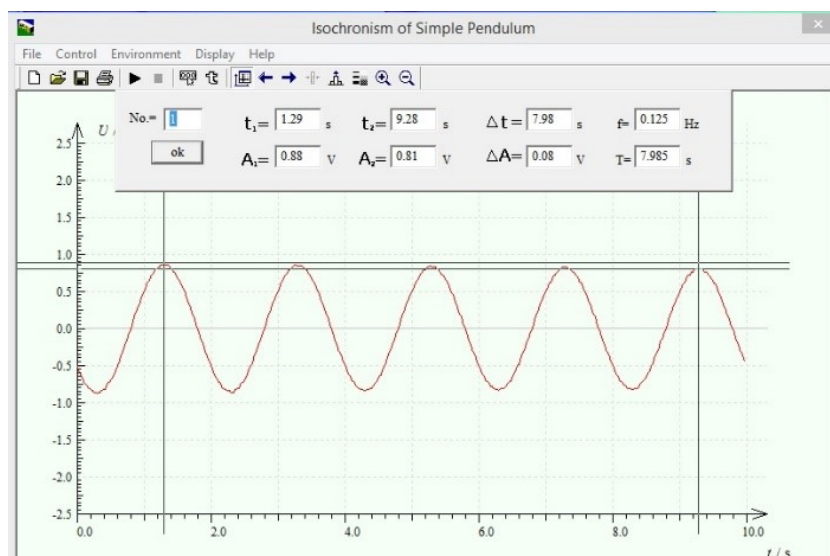


Figura 10. Gráfica del registro del voltaje en función del tiempo para el péndulo de aluminio en un intervalo de 10 s mostrando los valores de la herramienta Analyze para dos instantes de tiempo separados por 4 períodos.

Tabla 1. Valores del potencial, su logaritmo y el período para distintos instantes de tiempo del péndulo con esfera de madera

$t[s]$	$V(t) [V]$	$\ln V(t)$	$T [s]$
1.15	1.71	0.53649337	-
3.15	1.54	0.43178242	2
5.15	1.38	0.3220835	2
7.12	1.29	0.25464222	1.97
9.12	1.19	0.17395331	2
11.15	1.15	0.13976194	2.03
13.12	1.04	0.03922071	1.97
15.12	1.01	0.00995033	2
17.12	0.93	-0.07257069	2
19.12	0.88	-0.12783337	2
21.12	0.83	-0.18632958	2
23.12	0.79	-0.23572233	2
		T_{avg}	1.99727273

En la tabla 1 se presentan los valores de los voltajes para diferentes instantes de tiempo para el péndulo con esfera de madera.

Como esta se confeccionaron también para los otros dos péndulos. El período de las oscilaciones en cada caso se obtuvo como el promedio de las diferencias de tiempo entre los instantes correspondientes a los valores máximos del voltaje. En las figuras 11, 12, 13 se muestran las gráficas de $V(t)$ y $\ln V(t)$ contra t para cada uno de los tres péndulos con esferas de masas diferentes. En las mismas aparecen las ecuaciones de ajuste y en ellas el coeficiente de amortiguamiento γ .

En la tabla 2 se muestran de forma resumida los resultados de los ajustes lineales. Allí aparecen el coeficiente R2 que describe el grado de linealidad, los parámetros de las ecuaciones de ajuste (pendiente m que corresponde con $-\gamma$ e intercepto b), así como las incertidumbres de dichos parámetros.

Como se puede observar los valores del coeficiente de amortiguamiento aumentan con la disminución de la masa de la esfera. De la ecuación 7 es posible encontrar la razón entre la frecuencia angular de oscilación en el caso amortiguado respecto a la frecuencia angular del caso armónico, que viene

dada por:

$$\frac{\omega}{\omega_0} = \sqrt{1 - \left(\frac{\gamma}{\omega_0}\right)^2} \quad (8)$$

En la tabla 3 se brinda un resumen de los valores de los coeficientes de amortiguamiento γ , de sus cuadrados, de

la razón entre la frecuencia angular de oscilación en el caso amortiguado respecto a la frecuencia angular del caso armónico y del valor del término $e^{-\Delta t}$ para 90 s. Del análisis de esta tabla se puede llegar a la conclusión que en este caso la fricción de la esfera con el aire no trae consigo un cambio significativo en la frecuencia de oscilación del péndulo respecto a la frecuencia de oscilación del caso armónico.

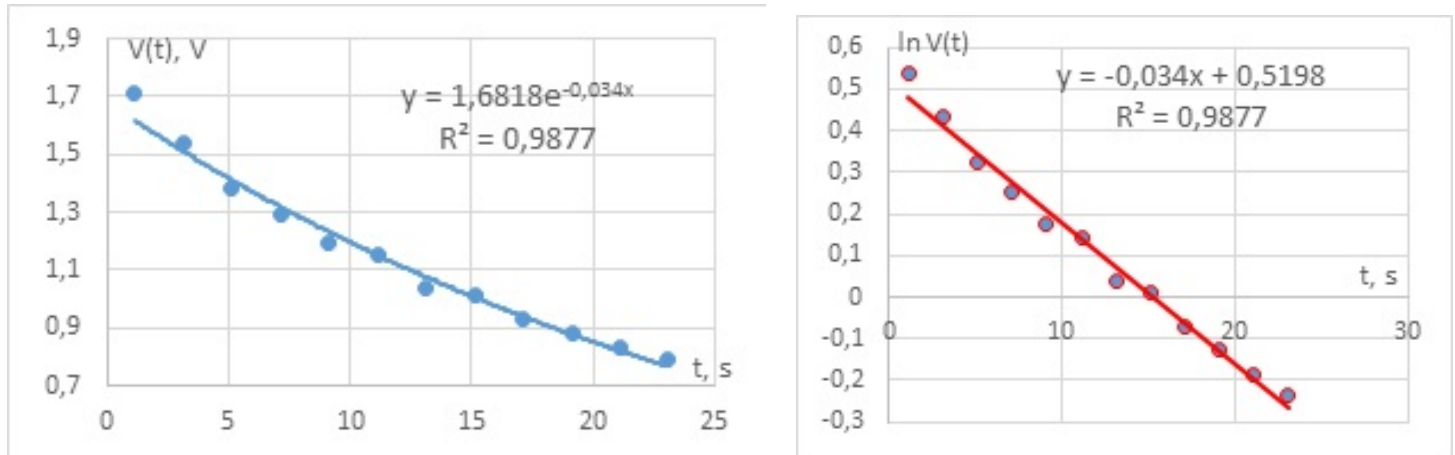


Figura 11. Gráficas de $V(t)$ y $\ln V(t)$ contra t ajustadas mostrando las ecuaciones de ajuste donde aparece el coeficiente de amortiguamiento γ y el parámetro R^2 para el péndulo con esfera de madera.

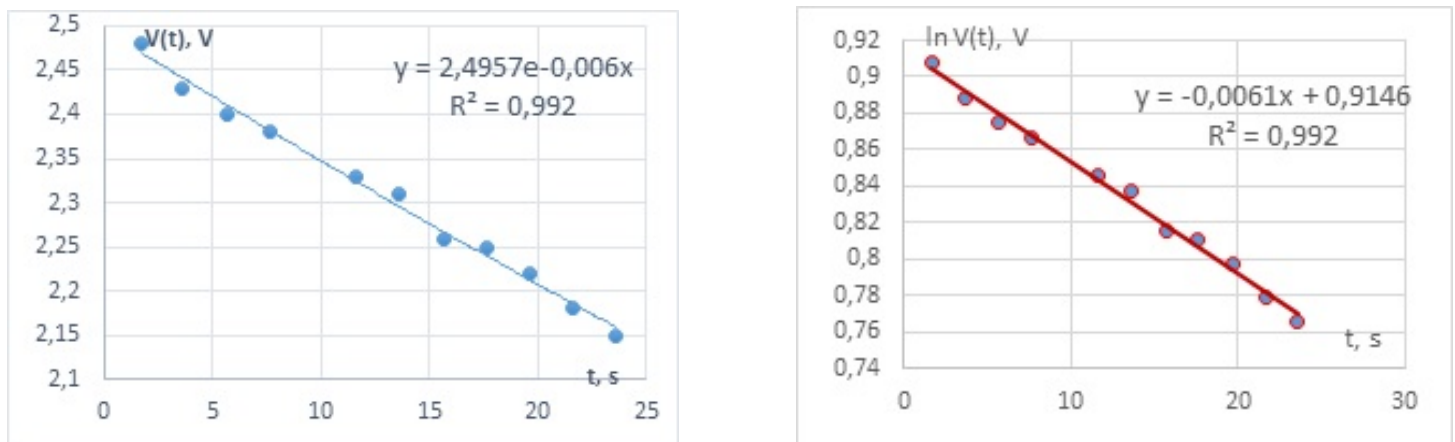


Figura 12. Gráficas de $V(t)$ y $\ln V(t)$ contra t ajustadas mostrando las ecuaciones de ajuste donde aparece el coeficiente de amortiguamiento γ y el parámetro R^2 para el péndulo con esfera de acero.

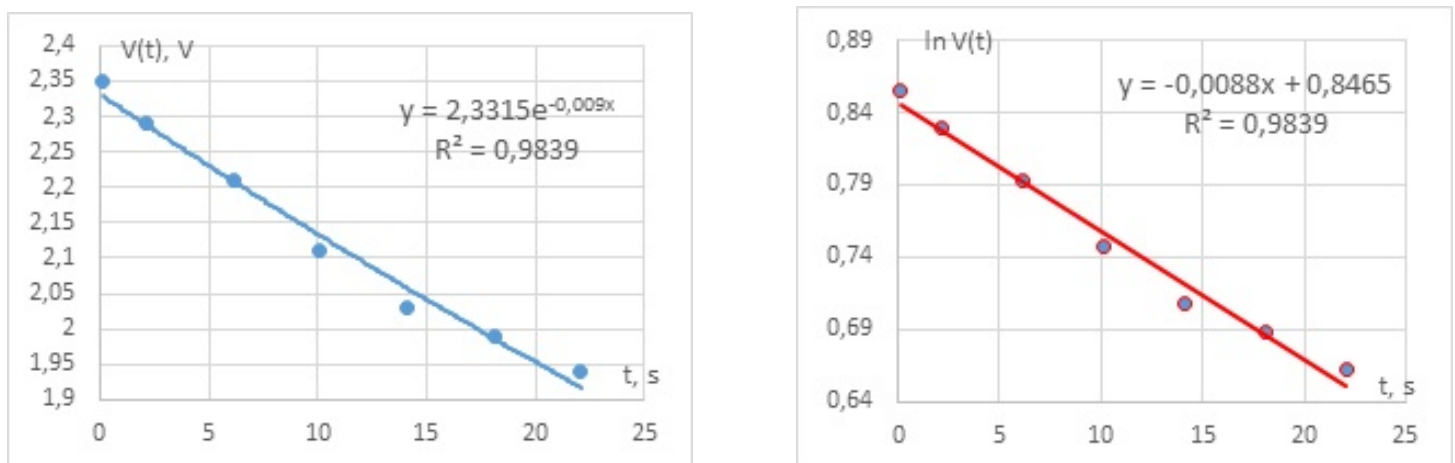


Figura 13. Gráficas de $V(t)$ y $\ln V(t)$ contra t ajustadas mostrando las ecuaciones de ajuste donde aparece el coeficiente de amortiguamiento γ y el parámetro R^2 para el péndulo con esfera de aluminio.

Tabla 2. Coeficientes R^2 , valores de las pendientes m e interceptos b de las ecuaciones de ajuste lineal y de sus incertidumbres para los péndulos estudiados.

Material de la esfera	Masa [g]	$\gamma = b/2m$ [s^{-1}] (-valor de la pendiente m)	b (intercepto de la recta con el eje y)	Coefficiente R^2	Δm	Δb
Acero	26.9	0.061	0.9146	0.992	0.0039	0.1701
Aluminio	9.8	0.0088	0.8465	0.9839	0.0072	0.3521
Madera	2.4	0.0340	0.5198	0.9877	0.0050	0.1748

Tabla 3. Valores de γ , γ^2 , ω/ω_0 y $e^{-\gamma t}$ para 90 s para los tres péndulos.

Masa [g]	γ [s^{-1}]	γ^2 [s^{-2}]	ω/ω_0	$e^{-\gamma t}$ para 90 s
26.9	0.061	0.00003721	0.999998098	0.577527049
9.8	0.0088	0.00007744	0.999996041	0.452938013
2.4	0.0340	0.001156	0.999940898	0.046887695

Tal vez de aquí que el título del experimento propuesto por el HPCI-1 sea isocronismo del péndulo simple y que en sus objetivos plantee que el movimiento es armónico simple si las oscilaciones son pequeñas. Sin embargo, la atenuación presente en la amplitud sí exhibe diferencias significativas pues en unos 45 períodos (90 s) ha disminuido casi al 58 % de su amplitud inicial en el péndulo con esfera de acero mientras que, para el péndulo con esfera de madera la disminución es casi al 4,7 % de su amplitud inicial.

El trabajo original del HPCI-1 sólo está planteado para realizar con la esfera de acero que es aquella en que los efectos son menores y para un breve intervalo de tiempo. Algunos registros obtenidos para este caso no detectaban cambio en la amplitud, como se muestra en la figura 2.

Como ya hemos afirmado se usa esta tecnología para arribar a las mismas conclusiones que se pueden llegar con otras variantes, se repite el nivel a que se analizan los fenómenos en la Enseñanza Media y en algunas ocasiones, como en el experimento que se analiza, para enfatizar o reforzar una situación que no se corresponde con la realidad. Es hora de que esta tecnología se emplee en revelar los aspectos relevantes de los fenómenos cuando estos se pueden estudiar con nuevas herramientas matemáticas en la Educación Superior (cálculo diferencial e integral, ecuaciones diferenciales, etc.) y entonces, se justifica usar las potencialidades de estos sistemas para revelar estos nuevos elementos y de esta manera avanzar en el nivel de asimilación y comprensión de los fenómenos respecto al nivel educacional anterior.

Evidentemente el registro eléctrico de las oscilaciones del péndulo permite estudiar éste en un caso más general que el armónico, que ya ha sido objeto de estudio en los niveles de enseñanza anteriores. Con este existe la oportunidad de mostrarle a los estudiantes que los péndulos reales al oscilar con oscilaciones pequeñas, pero en presencia de la fuerza de fricción viscosa entre la lenteja y el aire, ejecutan un movimiento amortiguado.

También se les puede enseñar cómo tratar el movimiento amortiguado, hallando experimentalmente el coeficiente de amortiguamiento, que es el parámetro que determina cómo se atenúa la amplitud de las oscilaciones y cuánto cambia la frecuencia respecto al caso armónico. Las nuevas ecuaciones a emplear para la descripción de este caso, que no son tan complejas, contienen precisamente este parámetro.

IV. CONCLUSIONES

- El registro eléctrico de las oscilaciones mecánicas, que se puede obtener con el sistema HPCI-1, permite realizar el estudio del movimiento del péndulo simple ejecutando oscilaciones pequeñas cuando existe presencia de fuerza de fricción del cuerpo con el aire cuando el movimiento ya no es armónico simple, sino infra amortiguado y rebasa con creces al original de dicho sistema.
- El estudio planteado se corresponde con el nivel de profundidad con que debe abordarse este tema en los cursos de Física en la Educación Superior, supera al nivel de la Enseñanza Media y potencia el uso de los SPLAC para estos fines.
- Respecto al movimiento armónico simple, la característica del movimiento amortiguado que más difiere es la amplitud de las oscilaciones y no su frecuencia angular.
- Esta práctica de laboratorio prepara al estudiante para el estudio experimental de otros tipos de oscilaciones que abordará en los cursos de Física posteriores como las electromagnéticas presentes en un circuito RLC.

REFERENCIAS

- [1] D. Amrani, P. Paradis, M. Beaudin, Rev. Mexicana Fis. E **54**, 59, (2008).
- [2] P. Amore, et al. Rev. Mexicana Fis. E **53**, 106 (2007).
- [3] R.B. Kidd, S.L. Fogg, Phys. Teacher, **40** (2002).
- [4] E. Salinas-Hernández, et al. Revista Mexicana de Física E **63**, 6 (2017).
- [5] R.R. Parwani, Eur. J. Phys. **25**, (2004).
- [6] L.E. Millet, Phys. Teacher **41**, (2003).
- [7] G. Torzo, P. Peranzoni, Lat. Am. J. Phys. Educ. **3**, 2 (2009).
- [8] M. Chávez, SCIÉENDO **20**, 1 (2017).
- [9] HPCI-1 Computer Aided Physics Laboratory. Experiment Manual. Version 4.0. U-Star Sensor Technology Co., Ltd.
- [10] HPCI-1 Computer Aided Physics Laboratory. Application Manual. Version 4.0. U-Star Sensor Technology Co., Ltd.

- [11] A. Hernández, G. Pérez, La evolución de los instrumentos de medición de las magnitudes físicas y su influencia en la modalidad y resultados de las prácticas de laboratorio de Física. Caso del péndulo simple. Memorias del VI Taller de Enseñanza de la Física, (Ediciones Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, 2019).
- [12] R. A. Serway, J. W. Jewett, Physics for Scientists and Engineers, 6th Ed. (Thomson Brooks/Cole, 2004).
- [13] H.D. Young, R.A. Freedman, Física Universitaria con Física Moderna Vol. 2, 13va Ed. (Pearson, México, 2013).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



AMPLIACIÓN DE LAS POSIBILIDADES DEL SISTEMA HPCI-1 PARA EL ESTUDIO DE LOS CIRCUITOS DE CORRIENTE ALTERNA

EXPANDING THE POSSIBILITIES OF THE HPCI-1 SYSTEM FOR THE STUDY OF ALTERNATING CURRENT CIRCUITS

A. HERNÁNDEZ-FEREIRA

Departamento de Física Facultad de Ingeniería, Universidad de Cienfuegos, Cuba; archdez@ucf.edu.cu[†][†] autor para la correspondencia

Recibido 1/2/2021; Aceptado 25/11/2021

En el Manual de Experimentos del laboratorio de Física asistido por computadora HPCI-1 de la firma U-Star Sensor Technology Co., Ltd. de China aparecen varios experimentos dedicados al estudio de los circuitos de corriente alterna. Entre ellos hay uno dedicado a determinar cualitativamente cómo varía el desfase entre la corriente y el voltaje en un circuito RC al variar la resistencia. Utilizando el circuito y el software específico de este experimento y otro circuito del sistema para otro experimento se diseñó el montaje de tres trabajos de laboratorio para determinar cuantitativamente cómo varía el desfase entre la corriente y el voltaje en los circuitos RC y RL al variar la resistencia y cómo se comporta dicho desfase en un circuito RLC cuando es predominantemente capacitivo, inductivo o está en resonancia. Se elaboró una propuesta de la práctica de laboratorio para incluir el análisis de los tres circuitos de corriente alterna.

In the Experiment Manual of the Computer Aided Physics Laboratory System HPCI-1 of U-Star Sensor Technology Co., Ltd (China), some experiments devoted to AC circuits are included. Among them there is one dedicated to determine qualitatively the phase shift between current and voltage in an RC circuit with resistance changes. Using the circuit and the specific software for this experiment and another circuit included for other experiment we have designed three lab projects for determining quantitatively the changes of phase shift between current and voltage in the RC and RL circuits with resistance change and how this phase shift behaves in a RLC circuit when it is predominantly capacitive, inductive or it is in resonance condition. A proposal of a lab practice that includes the study of the three circuits was introduced.

PACS: Teaching methods and strategies (métodos y estrategias de enseñanza), 01.40.gb; laboratory computer use (uso de computadores en el laboratorio), 01.50.Lc; data acquisition: hardware and software (adquisición de datos), 07.05.Fb; laboratory experiments and apparatus (aparatos y experimentos de laboratorio), 01.50.Pa

I. INTRODUCCIÓN

El sistema de prácticas de laboratorio de asistido por computadora (SPLAC) dedicado a la Física HPCI-1 de la firma U-Star Sensor Technology Co. de China fue adquirido por el Ministerio de Educación Superior para las universidades cubanas. El Manual de Experimentos que lo acompaña [1] contiene 6 capítulos dedicados a presentar los experimentos que se pueden realizar con el mismo. El Capítulo 4 está dedicado a los experimentos con circuitos y procesos transientes. Ellos aparecen desplegados en el menú principal del software tal y como se muestra en la figura 1.

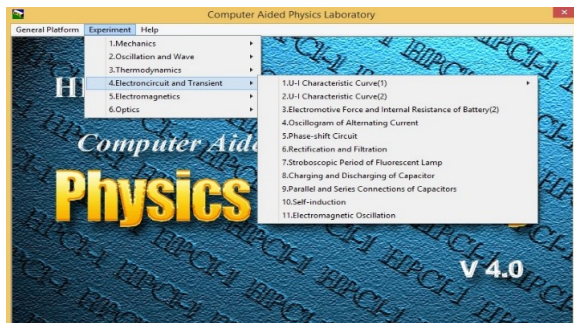


Figura 1. Aspecto de la pantalla del menú principal del software del SPLAC HPCI-1 mostrando los experimentos del capítulo 4.

Como se puede observar los experimentos están dedicados al estudio de circuitos de corriente directa (experimentos 4.1 al 4.3), circuitos de corriente alterna (experimentos 4.4 al 4.7) y procesos transientes que se presentan en circuitos RL, RC y RLC (experimentos 4.8 al 4.11). En particular el experimento 4.5 Phase-shift Circuit está dedicado a determinar el desfase entre la corriente y el voltaje en un circuito RC de corriente alterna. Al estudiar detenidamente este trabajo se pueden detectar las siguientes limitaciones en el mismo:

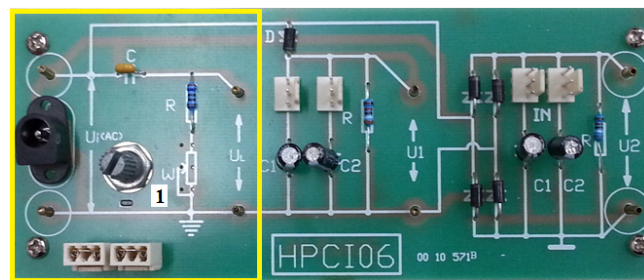


Figura 2. Sección del circuito HPCI06 empleada para el experimento 4.5. Se muestran los elementos del circuito, la entrada de voltaje CA y los puntos de conexión de los sensores para la medición de los voltajes U_i y U_L .

1) El trabajo pretende determinar el desfase entre el voltaje aplicado por una fuente de corriente alterna (CA) y la corriente que circula por un circuito RC conectado a la misma. Para ello,

usando una facilidad del sistema, mide el desfase entre los máximos de las señales de voltaje en el tiempo de la fuente U_i y la resistencia U_L . En la figura 3 se ilustra esta facilidad según la muestra la pantalla del sistema.

Esta determinación sólo puede hacerse de forma cualitativa porque no es posible conocer los valores de la resistencia empleada que resulta de la combinación en serie de las resistencias R y W del potenciómetro 1 incluidas en la sección resaltada en amarillo del circuito HPCI06 que se emplea para este experimento y que se muestra en la figura 2.

$$\tan \phi = \frac{X_C}{R} = \frac{1}{\omega RC} = \frac{1}{2\pi f RC'} \quad (1)$$

entre el ángulo de desfase ϕ y los valores de ω (f), R y C de forma cuantitativa es necesario conocer los valores

de estos últimos parámetros y medir el desfase. Con lo sugerido en el experimento sería necesario disponer de un puente de medición RLC y determinar el valor de la resistencia resultante cada vez que se cambie la misma al manipular el potenciómetro.

2) Lo único que puede hacer el estudiante es verificar la relación:

$$\phi = \omega \Delta t = \left(\frac{2\pi}{T}\right) \Delta t = \frac{\Delta t}{T} (2\pi \text{ rad}) = \frac{\Delta t}{T} (360^\circ), \quad (2)$$

que es la empleada por el sistema para hallar el desfase a partir de medir el intervalo de tiempo Δt entre dos máximos consecutivos de las señales con la facilidad antes mencionada obteniendo los valores de Δt y T de la misma y compararla con la que allí se ofrece (ver figura 2).

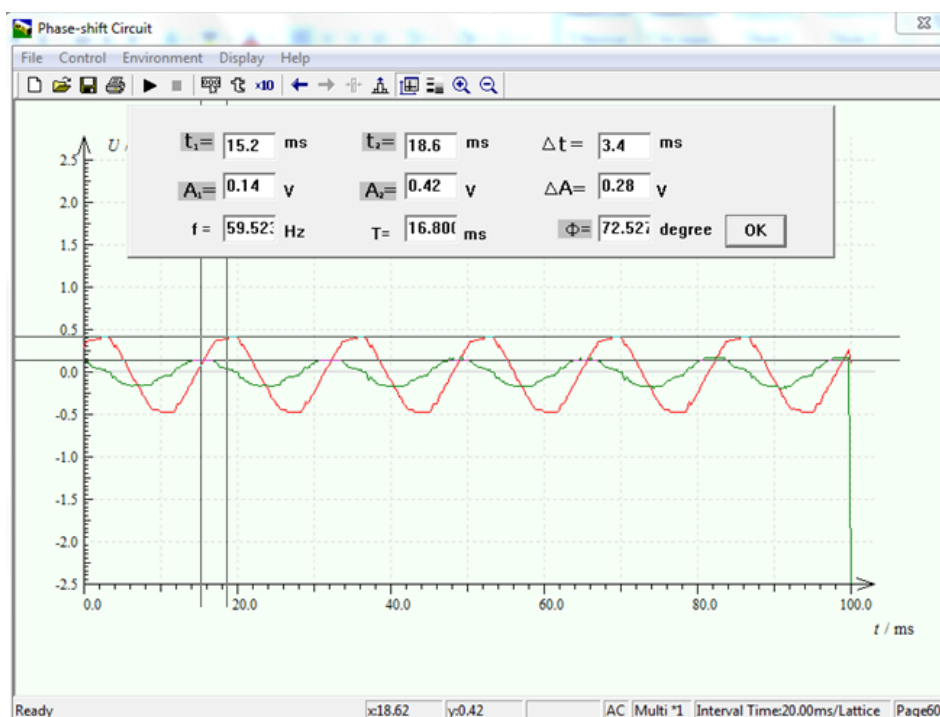


Figura 3. Aspecto de la pantalla que registra las dos señales de voltaje CA en el tiempo mostrando la medición con la facilidad para determinar las variaciones en las amplitudes y en la fase de las dos señales en dos instantes de tiempo seleccionados.

3) Complementariamente, la señal de CA que se introduce al circuito desde la interfaz presenta mucha distorsión y hace imprecisa la determinación de los valores máximos de las dos señales a comparar y del desfase entre ellas, como también puede apreciarse en la figura 3.

A partir de analizar las posibilidades del software asociado con este experimento y del fundamento del mismo, concluimos que se podrían realizar algunos experimentos relativos a los circuitos de corriente alterna, pero con comprobaciones experimentales de carácter cuantitativo que profundizaran en los principales resultados teóricos que generalmente se deducen en clase en los cursos de Física General de la mayoría de las carreras universitarias.

Los experimentos propuestos se pueden integrar en una sola

práctica de laboratorio que es posible realizar en las 2 horas que normalmente dura una práctica. La forma de abordar el fundamento teórico debe partir del caso más general de un circuito RLC en serie (con los tres tipos de componentes) conectado a una fuente de CA. Para este circuito se pueden obtener las relaciones cuantitativas fundamentales a partir, por ejemplo, del diagrama fasorial como es muy común en los libros de textos más usados [2–5].

Entre las relaciones más importantes podemos destacar:

- la expresión general de la impedancia del circuito

$$Z = \sqrt{R^2 + (X_L - X_C)^2} = \sqrt{R^2 + \left(\omega L - \frac{1}{\omega C}\right)^2} \quad (3)$$

- la expresión de la amplitud de la corriente en el circuito

$$I = \frac{V}{Z} \quad (4)$$

- la expresión del ángulo de desfase entre la corriente y el voltaje de la fuente

$$\tan \phi = \frac{X_L - X_C}{R} = \frac{\omega L - \frac{1}{\omega C}}{R} \quad (5)$$

todas en función de los parámetros de los elementos que componen el mismo (R , L y C) y la frecuencia ω (f) de la fuente de CA que lo alimenta. Otro aspecto importante es verificar cómo se comportan los mismos en la condición de resonancia. Observemos que todas las expresiones anteriores para el circuito RLC en serie siguen siendo válidas en ausencia de algunos de los elementos del circuito. Si falta el resistor, se fija $R = 0$; si falta el inductor, se establece $L = 0$ y si falta el capacitor, se fija $C = 0$. Esto permite estudiar por separado el resultado de la presencia de cada uno de los tres tipos de dispositivos en la amplitud de la corriente y el desfase entre esta y el voltaje aplicado.

Así podríamos inicialmente verificar cuantitativamente para el circuito RC. En este caso con $L = 0$ de (3) obtenemos:

$$Z = \sqrt{R^2 + X_C^2} = \sqrt{R^2 + \left(\frac{1}{\omega C}\right)^2} \quad (6)$$

$$\cot \phi = \omega RC = 2\pi fRC,$$

cuya expresión es más conveniente que la que contiene a la tangente de ϕ . Para el circuito RL con $C \rightarrow \infty$ de (7) obtenemos la expresión:

$$\tan \phi = \frac{X_L}{R} = \frac{\omega L}{R}. \quad (7)$$

entre el ángulo de desfase ϕ y los valores de ω (f), R y L .

En el caso del circuito con un resistor solamente también podría verificarse que $\phi = 0$ y que $I = \frac{V}{R}$. Como esto es más evidente decidimos no incluir este ejercicio, pero pudiera realizarse. De todas formas, este caso se obtiene en el circuito RLC en condición de resonancia cuando se comporta como resistivo puro y será objeto de uno de los ejercicios siguientes.

Luego podríamos pasar al análisis del circuito RLC con los tres tipos de elementos y verificar el comportamiento del desfase y la amplitud de la corriente para un circuito predominantemente inductivo, capacitivo y finalmente en condición de resonancia.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

Para nuestros propósitos empleamos los circuitos que acompañan al sistema HPCI-1, en particular los circuitos HPCI06 y HPCI04 que contienen los elementos necesarios para los experimentos. Se puede utilizar estos elementos por separados si se disponen de ellos en el laboratorio y montar los

circuitos. Adicionalmente empleamos una caja de resistencia decádica tipo TR-9403/C, el puente de medición digital LCR XJ2811C y un generador de señales de audio (50 Hz-23 kHz) con display digital para la frecuencia.

A. Estudio del circuito RC en circuitos de CA

Para este trabajo de laboratorio empleamos la sección resaltada en amarillo localizada en la parte izquierda de la placa HPCI06 como se presenta en la figura 2. Allí se muestran en detalle los elementos circuitales donde se puede identificar (de izquierda a derecha) la entrada del voltaje U_i de CA a través de la cual ingresamos la señal de un generador externo y donde se coloca un sensor de voltaje E para medirla, el capacitor C , cuya capacitancia se va a determinar, la resistencia R fija y la variable W , que de conjunto dan la resistencia total del circuito, que fueron reemplazadas por una caja de resistencias decádica y los puntos para la medida del voltaje en la resistencia total U_L , donde colocamos un sensor de voltaje B. Precisamente las señales de los voltajes U_i y U_L en el tiempo son las que aparecen en color verde y rojo respectivamente en la pantalla que muestra el sistema al ejecutar el trabajo. Una vez que se ha detenido el proceso de obtención de las señales se puede medir el desfase usando la facilidad anteriormente mostrada. Este proceso se puede realizar para un grupo de valores de la resistencia establecido en la caja decádica. A partir del ploteo de los valores de $\cot \phi$ contra ωR , que resulta lineal, se puede obtener el valor de la capacitancia C de la pendiente de la ecuación de ajuste por mínimos cuadrados. Para ello usamos EXCEL de Microsoft.

B. Estudio del circuito RL en circuitos de CA

Para este trabajo de laboratorio empleamos la sección señalada en amarillo a la derecha de la placa HPCI04 relativa al circuito RLC del sistema, una foto de la cual se presenta en la figura 4. En la misma se muestra en detalle la mencionada sección donde se identifican la bobina con núcleo cuya inductancia L se va a determinar y los puntos de conexión a, b, c y d.

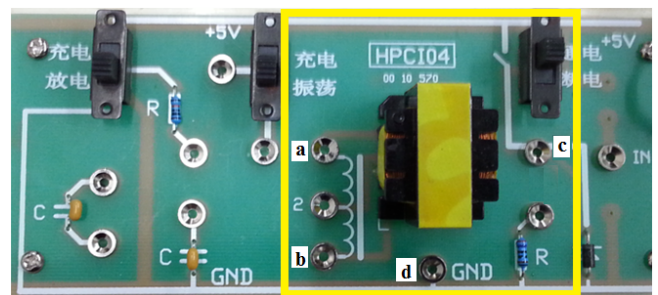


Figura 4. Sección del circuito HPCI04 empleada para el experimento relativo al estudio del circuito RL de CA. Se muestran los puntos a y b de conexión de la bobina con núcleo y los puntos c y d de conexión de la caja de resistencia decádica. Un cable conectado entre b y c conforma el circuito RL en serie.

La entrada de la señal U_i de CA (proveniente de un generador de señales externo) se realiza entre los puntos a y d, la resistencia variable (caja de resistencias decádica) se conecta entre los puntos c y d y los puntos b y c se unen por un cable de conexión. Así queda conformado el circuito. El sensor para registrar el voltaje U_L en los extremos de la resistencia de carga se conecta entre los puntos c y d y el sensor para registrar el voltaje U_i de la fuente entre a y d.

De nuevo, las señales de los voltajes U_i y U_L en el tiempo son las que aparecen en color verde y rojo respectivamente en la pantalla que muestra el sistema al ejecutar el trabajo. Una vez que se ha detenido el proceso de obtención de las señales se puede medir el desfase usando la facilidad ya anteriormente mencionada. Este proceso se puede realizar para un grupo de valores de la resistencia establecido en la caja decádica. A partir del ploteo de los valores de $\tan \phi$ contra ω/R , que resulta lineal, se puede obtener el valor de L de la pendiente de la recta de ajuste por mínimos cuadrados. Para ello usamos EXCEL de Microsoft.

C. Estudio del circuito RLC en circuitos de corriente CA. Condición de resonancia.

Para este trabajo de laboratorio también empleamos la placa HPCI04 relativa al circuito RLC del sistema, una foto de la cual se presenta en la figura 5.

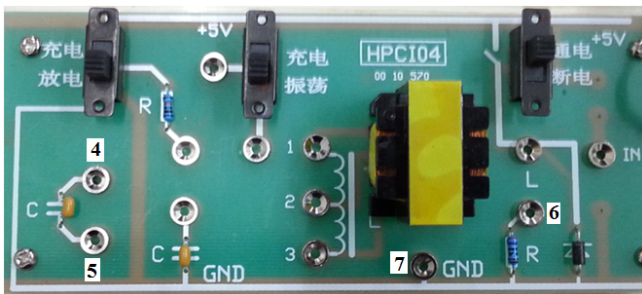


Figura 5. Aspecto del circuito HPCI04 usado para el experimento relativo al circuito RLC en CA. Se muestran los puntos de conexión de los elementos de la placa usados en este caso: puntos 1 y 3 para la bobina con núcleo, 4 y 5 para el capacitor y 6 y 7 para el resistor. Al conectar los puntos 3 con 4 y 5 con 6 queda conformado el circuito RLC en serie.

En la misma se identifican los puntos de conexión del 1 al 7. Se conectan, mediante los propios cables que brinda el sistema para los circuitos, el punto 3 con el 4 y el 5 con el 6. Así queda conformado el circuito RLC usando los elementos que están en la placa. La entrada de la señal U_i de CA (proveniente de un generador de señales externo) se realiza entre los puntos 1 y 7. El sensor para registrar el voltaje U_L en los extremos de la resistencia de carga se conecta entre los puntos 6 y 7 y el sensor para registrar el voltaje U_i de la fuente entre 1 y 7.

Como está prestablecido en el experimento que hemos estado usando, las señales de los voltajes U_i y U_L en el tiempo aparecen en color verde y rojo respectivamente en la pantalla que muestra el sistema al ejecutar el trabajo. En este caso podemos variar la frecuencia del generador y observar la posición relativa de ambas curvas. Para una frecuencia dada, en dependencia de si predomina el componente capacitivo o inductivo una señal adelantará a la otra y coincidirán para la frecuencia de resonancia.

En este caso se puede verificar la condición de resonancia del circuito (cuando $\omega = 1/\sqrt{LC}$) en la cual la amplitud de la corriente se hace máxima y el desfase entre la corriente por el resistor y el voltaje suministrado por la fuente se hace cero. De igual manera se puede verificar el retardo o adelanto de la corriente respecto al voltaje de la fuente en dependencia del carácter predominantemente capacitivo o inductivo del circuito (que se puede lograr para frecuencias inferiores y superiores a la frecuencia de resonancia).

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A. Estudio del circuito RC en circuitos de CA

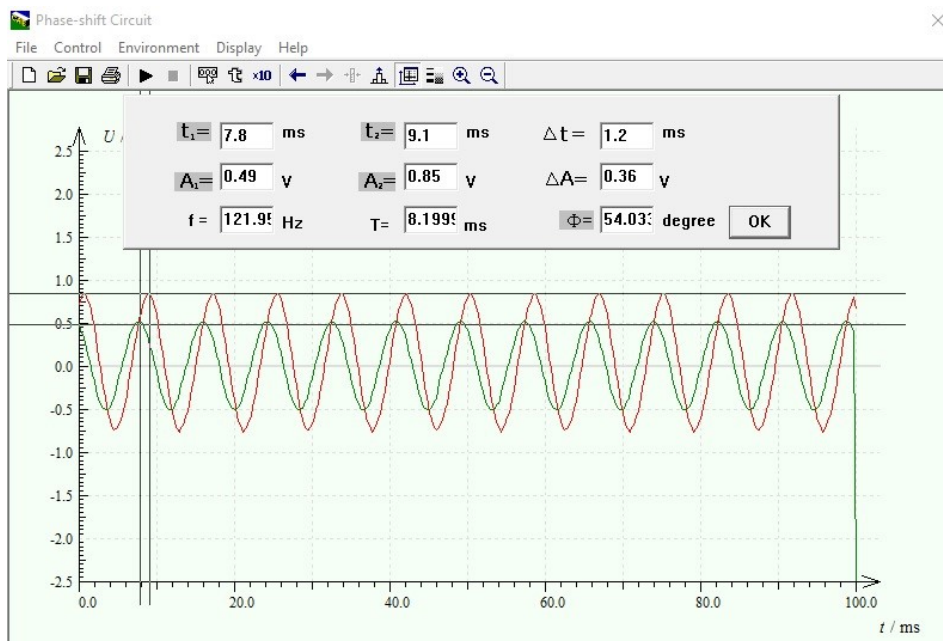


Figura 6. Aspecto de la pantalla que registra las dos señales de voltaje CA en el tiempo para el circuito RC en CA mostrando la medición con la facilidad para determinar las variaciones en las amplitudes y en la fase de las dos señales en dos instantes de tiempo seleccionados.

Luego de conectar la caja de resistencia decádica, el generador de señales y los sensores de voltaje como se describió anteriormente en la placa HPCI06 se seleccionó el experimento 5 Phase-shift Circuit en la sección Electronics and Transient del sistema HPCI-1 (ver figura 1) y se registran los voltajes de la fuente y entre los terminales de la resistencia. El aspecto de la pantalla es el que se muestra en la figura 6.

Allí se puede observar la señal en verde correspondiente al voltaje de la fuente y la señal en rojo correspondiente a la caída de voltaje en la resistencia y cómo en este caso particular la segunda está adelantada a la primera como corresponde a un circuito con impedancia capacitiva. También se muestra la facilidad del sistema HPCI-1 para este trabajo de laboratorio con la cual se pueden determinar para dos instantes seleccionados las amplitudes de los voltajes (A_1 y A_2), los instantes de tiempo correspondientes (t_1 y t_2), sus diferencias, (ΔA y Δt), el período (T), la frecuencia (f) de las señales y el ángulo de desfase en grados (ϕ) entre ellos.

Realizando esta operación para diferentes valores de la resistencia en el circuito, establecido mediante la caja de resistencia decádica, se determinaron los ángulos de desfase entre las señales y se construyó la gráfica que aparece en la

figura 7.

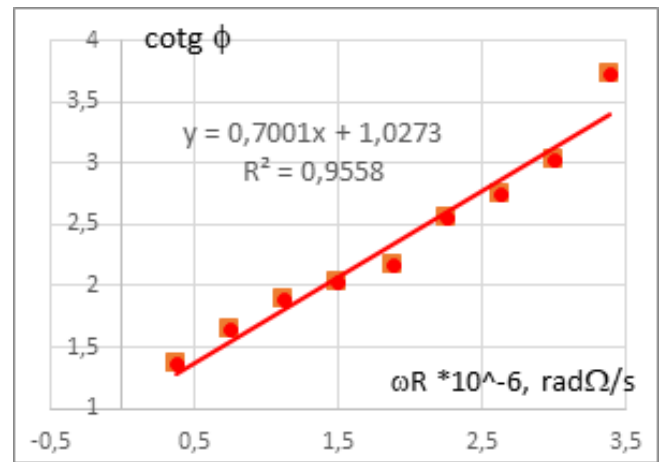


Figura 7. Gráfica del ploteo de $\cot \phi$ contra ωR mostrando la ecuación de ajuste por mínimos cuadrados y el coeficiente R^2 .

En la misma se han ploteado los valores de la cotangente del ángulo de desfase entre la corriente por el resistor y el voltaje suministrado por la fuente contra el producto ωR .

La gráfica exhibe un comportamiento lineal con muy buena correlación ($R^2 = 0,9558$) lo cual corrobora la justeza de la relación 6 y el valor de $0,70 \mu\text{F}$ obtenido para la capacidad del condensador es cercano al valor de $0,79 \mu\text{F}$ obtenido con un puente de medición digital RLC. La incertidumbre relativa tomando como referencia la medición del puente fue del 12 %.

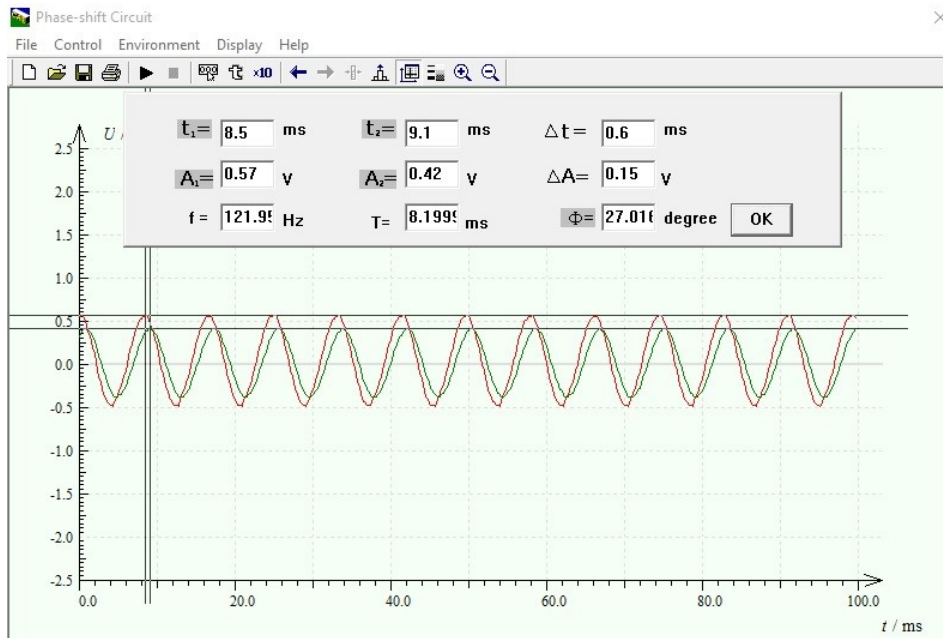


Figura 8. Aspecto de la pantalla que registra las dos señales de voltaje CA en el tiempo para el circuito RL en CA mostrando la medición con la facilidad para determinar las variaciones en las amplitudes y en la fase de las dos señales en dos instantes de tiempo seleccionados.

B. Estudio del circuito RL en circuitos de CA

Una vez que se conectó la caja de resistencia decádica, el generador de señales y los sensores de voltaje a la placa HPCI04 como se describió anteriormente, se

activó nuevamente el experimento 5 para registrar los voltajes de la fuente y entre los terminales del resistor. El aspecto de la pantalla resultó ser el que se muestra en la figura 8. Como se puede observar es similar al que se muestra en la figura 6. La única diferencia es que, en este, la señal en

verde, correspondiente al voltaje de la fuente, está adelantada a la señal en rojo, correspondiente a la caída de voltaje en la resistencia, como corresponde a un circuito con impedancia inductiva.

Una vez más, para diferentes valores de la resistencia en el circuito se determinaron los ángulos de desfase entre las señales y se construyó la gráfica que aparece en la figura 9. En la misma se han planteado los valores de la tangente del ángulo de desfase ϕ entre la corriente por el resistor y el voltaje suministrado por la fuente contra el cociente ω/R .

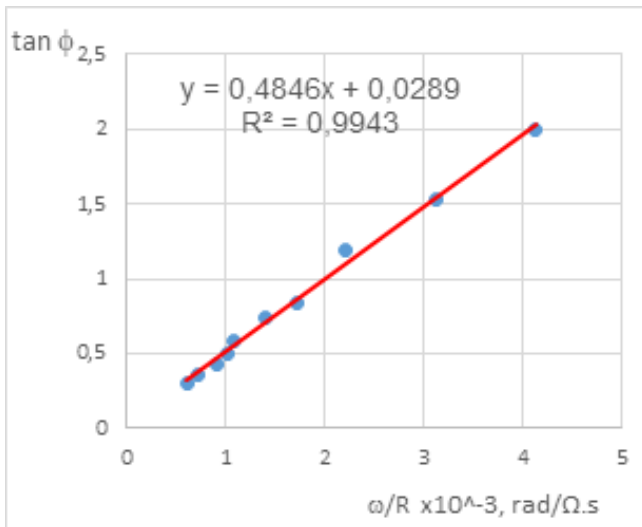


Figura 9. Gráfica del ploteo de $\tan \phi$ contra ω/R mostrando la ecuación de ajuste por mínimos cuadrados y el coeficiente R^2 .

La gráfica exhibe un comportamiento lineal con muy buena correlación ($R^2 = 0,9943$) lo cual corrobora la justeza de la relación (7) y el valor de 485 mH obtenido para la inductancia de la bobina es cercano al valor de 528 mH obtenido con un puente de medición digital RLC. La incertidumbre relativa tomando como referencia la medición del puente fue del 8 %.

C. Estudio del circuito RLC en circuitos de corriente CA. Condición de resonancia.

Luego de efectuar las conexiones para este trabajo en la placa HPCI04 y de alimentar con un generador de CA como se describió anteriormente se activó el experimento 5 y se observaron la curva verde del voltaje de la fuente y la curva roja del voltaje entre los terminales de la resistencia. Variando la frecuencia del generador logramos que el aspecto de la pantalla resultara ser el que se muestra en la figura 10 donde coincidían las posiciones de ambas señales.

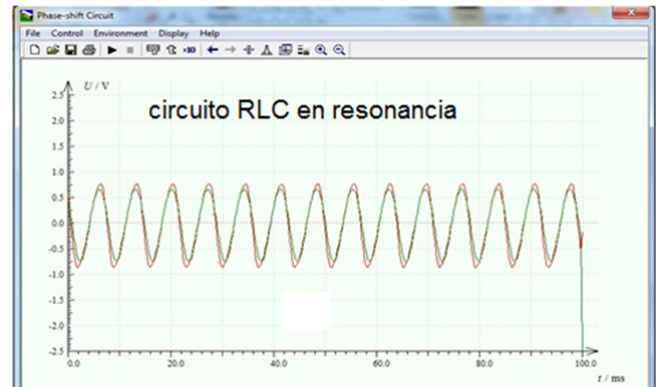


Figura 10. Aspecto de la pantalla que registra las dos señales de voltaje CA en el tiempo para el circuito RLC serie en CA. Se puede observar la coincidencia de las dos señales en el tiempo como corresponde a la condición de resonancia.

Esta corresponde al circuito cuando está en condición de resonancia. Como puede observarse, ambas señales están en fase y como podrá verificarse más tarde la amplitud del voltaje entre los terminales de la resistencia alcanza el valor máximo, superior a los dos casos que mostraremos a continuación. Estas son precisamente las características más importantes a destacar para los circuitos de CA en la condición de resonancia.

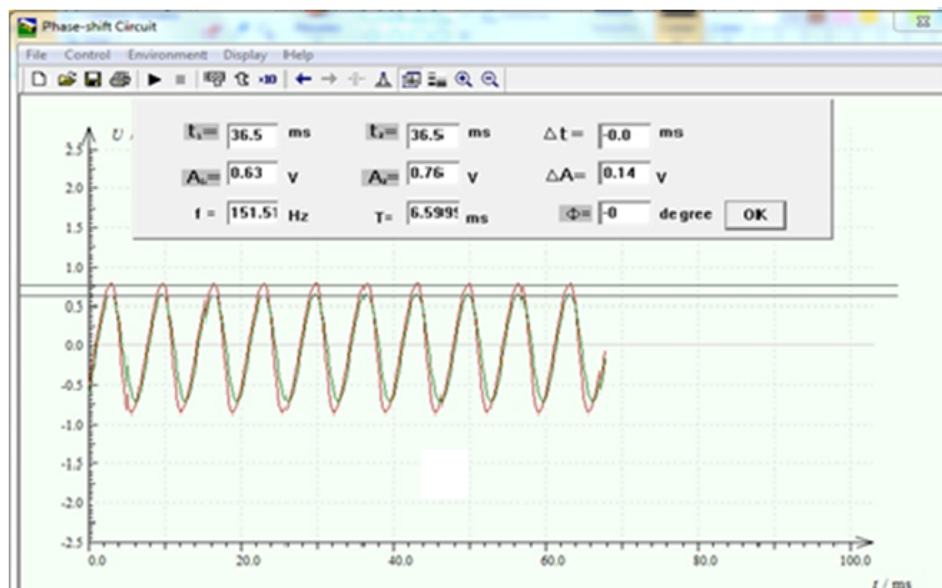


Figura 11. Aspecto de la pantalla que registra las dos señales de voltaje CA en el tiempo para el circuito RLC serie en CA mostrando la medición con la facilidad para determinar las variaciones en las amplitudes y en la fase de las dos señales en dos instantes de tiempo seleccionados.

En la figura 11, donde aparece la facilidad para determinar cuantitativamente las magnitudes, se puede ver que el desfase vale cero ($\phi = 0$), se puede determinar el valor de la frecuencia de resonancia de 115.51 Hz y se puede observar la pequeña diferencia entre las amplitudes de las dos señales ($\Delta A = 0,14$).

Como estamos trabajando con los mismos elementos del circuito y por ende no cambiamos los valores de la capacitancia del condensador, ni de la inductancia de la bobina los valores de la reactancia capacitiva X_C y de la reactancia inductiva X_L se modifican a través del cambio en la frecuencia de la señal del generador externo que suministra el voltaje alterno. Durante la resonancia $X_C = X_L$.

Si aumentamos la frecuencia por encima del valor de resonancia, entonces $X_C < X_L$ el circuito exhibe un comportamiento correspondiente a uno con predominio del componente inductivo. En la figura 12 se muestra el aspecto de la pantalla para una frecuencia superior a la de resonancia

y se evidencia el retardo de la corriente respecto al voltaje de la fuente.

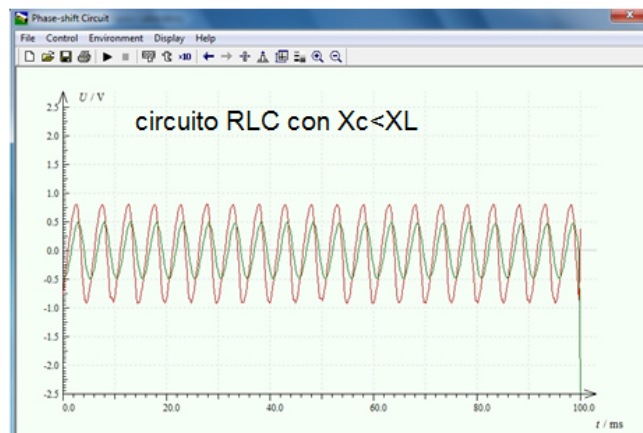


Figura 12. Aspecto de la pantalla que registra las dos señales de voltaje CA en el tiempo para el circuito RLC serie en CA. Se puede observar la coincidencia de las dos señales en el tiempo como corresponde a la condición de resonancia.

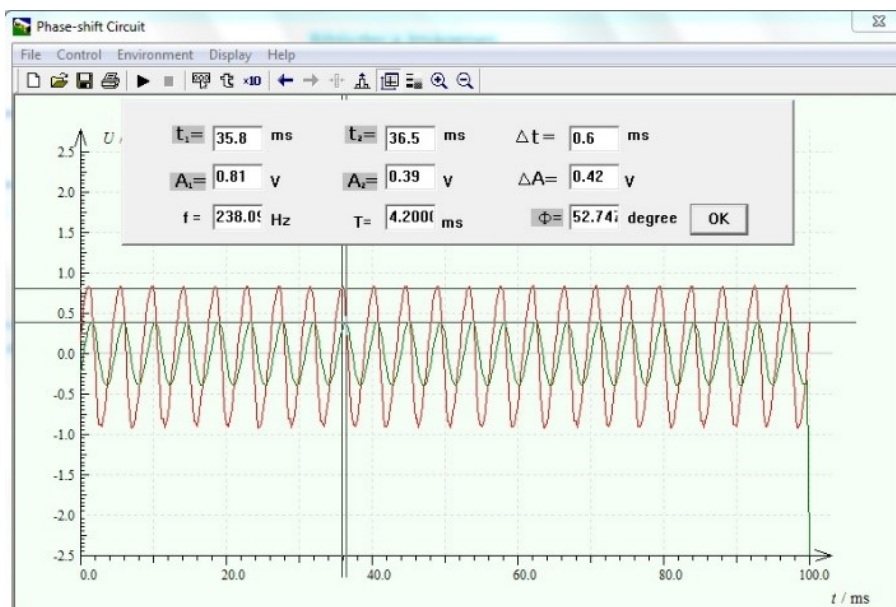


Figura 13. Aspecto de la pantalla que registra las dos señales de voltaje CA en el tiempo para el circuito RLC serie en CA mostrando la medición con la facilidad para determinar las variaciones en las amplitudes y en la fase de las dos señales en dos instantes de tiempo seleccionados.

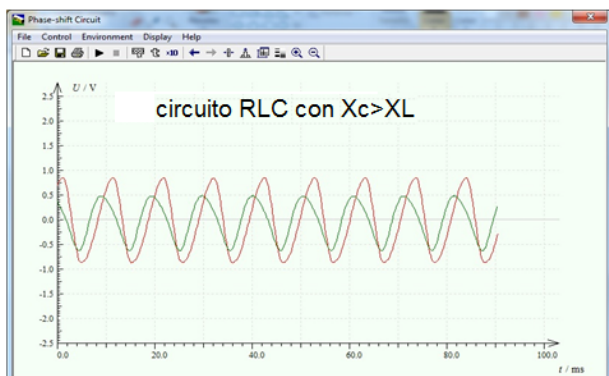


Figura 14. Aspecto de la pantalla que registra las dos señales de voltaje CA en el tiempo para el circuito RLC serie en CA. Se puede observar el adelanto de la corriente en el resistor respecto al voltaje del generador como corresponde a un circuito predominantemente capacitivo.

En la figura 13, donde aparecen los valores que brinda el uso de la facilidad ya antes descrita, se puede ver que la frecuencia era de 238.09 Hz, el valor del desfase de 52.74 grados y que los valores de la amplitud de la corriente no alcanzan a los de la figura 11 correspondiente a la resonancia (en este caso $\Delta A = 0,42$).

Por último, cuando redujimos la frecuencia por debajo del valor de la frecuencia de resonancia, entonces $X_C > X_L$ y el comportamiento es el correspondiente a un circuito con predominio del componente capacitivo. Para este caso en la figura 14 se muestra el aspecto de la pantalla para una frecuencia superior a la de resonancia y se evidencia el adelanto de la corriente respecto al voltaje de la fuente.

En la figura 15, donde aparecen los valores que brinda el uso de la facilidad ya antes descrita, se puede ver que la frecuencia

era de 98.04 Hz, el valor del desfase de 81.44 grados y que los valores de la amplitud de la corriente no alcanzan tampoco a los de la figura 11 correspondiente a la resonancia (en este caso $\Delta A = 0,36$). El registro del tiempo necesario para realizar

los 5 ejercicios de estos tres experimentos nos corrobora la idea inicial de agruparlos en una sola práctica de laboratorio dedicada al estudio general de los circuitos de CA a partir de seguir la estrategia aquí planteada.

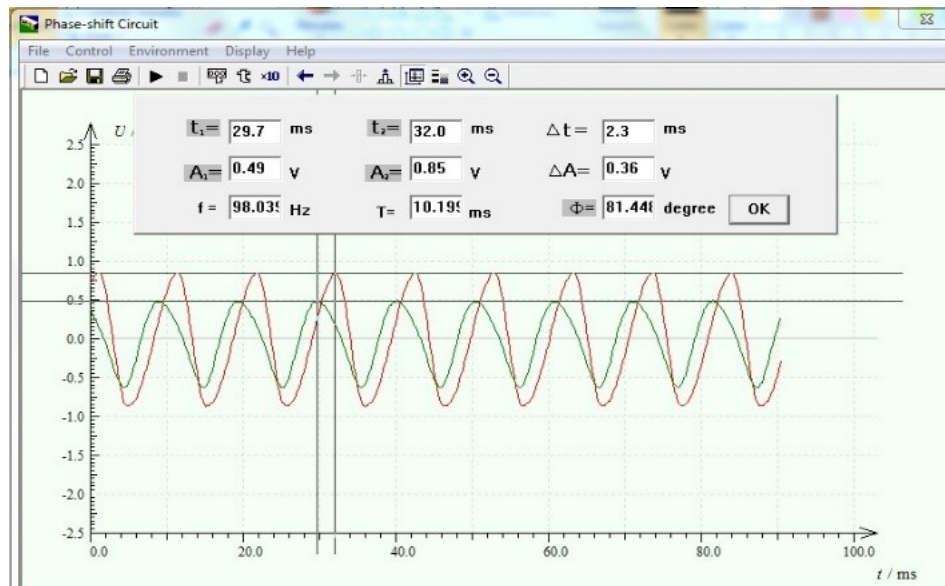


Figura 15. Aspecto de la pantalla que registra las dos señales de voltaje CA en el tiempo para el circuito RLC serie en CA mostrando la medición con la facilidad para determinar las variaciones en las amplitudes y en la fase de las dos señales en dos instantes de tiempo seleccionados.

IV. CONCLUSIONES

- Es posible ampliar las posibilidades del uso del laboratorio de Física asistido por computadoras HPCI-1 a partir de utilizar las facilidades del mismo de forma más creativa.
- La ampliación se puede hacer empleando los elementos de los circuitos que lo acompañan e introduciendo algunos equipos generales del laboratorio tales como generadores de señales, puente de medición RLC y cajas de resistencias.
- Lo fundamental es modificar los trabajos para verificar experimentalmente las relaciones que describen los fenómenos físicos de forma cuantitativa.
- Los resultados obtenidos tienen buena concordancia con los valores previstos teóricamente y contribuirán a reforzar el material teórico al hacerlo más verosímil.
- Los tres experimentos de laboratorio propuestos se pueden introducir de inmediato en calidad de prácticas de laboratorio para el tema circuitos de CA en el curso

de Física II y se pueden realizar en un turno de clase de laboratorio de 2 horas.

REFERENCIAS

- [1] HPCI-1 Computer Aided Physics Laboratory. Experiment Manual. Version 4.0. U-Star Sensor Technology Co., Ltd., pp. 96 – 97.
- [2] D. Halliday, R. Resnick, K. S. Krane, Física Versión ampliada Vol.2, 4ta Ed. (Compañía Editorial Continental, S.A. de C.V., México, 1999).
- [3] H.D. Young, R. A. Freedman, Sears y Zemansky Física Universitaria con Física Moderna Vol. 2, 13va Ed. (Pearson, México, 2013).
- [4] R. A. Serway, J. W. Jewett, Physics for Scientists and Engineers, 6th Ed. (Thomson Brooks/Cole, 2004).
- [5] H. A. Radi, J. O. Rasmussen, Principles of Physics for Scientists and Engineers, Undergraduate Lecture Notes in Physics, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2013).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



THE 2021 PHYSICS NOBEL PRIZE: CLIMATE AND DISORDER

EL PREMIO NOBEL DE FÍSICA DE 2021: CLIMA Y DESORDEN

R. MULET[†]Group of Complex Systems and Statistical Physics, Department of Theoretical Physics. Physics Faculty, University of Havana. CP 10400, La Habana, Cuba; mulet@fisica.uh.cu[†][†] corresponding author

Recibido 27/11/2020; Aceptado 29/11/2020

The 2021 Nobel Prize in Physics was jointly awarded to Syukuro Manabe, Klaus Hasselmann and Giorgio Parisi, “for groundbreaking contributions to our understanding of complex physical systems”. The Prize was divided in two parts, Manabe and Hasselmann were recognized for their modelling of Earth’s climate and Giorgio Parisi for the discovery of the interplay between disorder and fluctuations in physical systems. Here we review the more important aspects of these contributions and try to put them within a unique conceptual framework.

El premio Nobel en Física del 2021 fue otorgado a Syukuro Manabe, Klaus Hasselmann y Giorgio Parisi, por el impacto de sus contribuciones a la comprensión de los sistemas complejos. El premio se dividió en dos partes, Manabe y Hasselmann fueron reconocidos por sus trabajos de modelación del clima de la Tierra y Giorgio Parisi por haber descubierto la conexión entre el desorden y las fluctuaciones en los sistemas físicos. Aquí resumimos los aspectos más importantes de estas contribuciones tratando de colocarlas dentro de un mismo marco conceptual.

PACS: Complex systems (sistemas complejos), 89.75.-k; modeling of global climate (modelación del clima global), 92.70.Np

I. INTRODUCTION: FLUCTUATIONS AND DISORDER

When physicists talk about fluctuations they usually formalize the idea using a Langevin-like equation [1] that in its simplest version takes the following form:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} + \eta(t) \quad (1)$$

where x represents the system’s coordinate, $V(x)$ is a potential and η encodes the information about the fluctuations in the system. The latter term is a “noise” function defined by its statistical properties, for example, the mean and the variance. The task is to understand, given $V(x)$ and the statistical properties of η how x evolves in time. The difficulty comes from the fact that given the statistical nature of η there is a possible ensemble of $x(t)$ consistent with equation (1).

This ensemble of trajectories can be characterized by a probability distribution that, under very general conditions, and in the long time limit, can be written as [2]:

$$P(x) = \frac{e^{-\beta V(x)}}{Z} \quad (2)$$

where β is defined by the fluctuations in η , and Z is a partition function.

Things become much more difficult when x is not a coordinate, but a bunch of them, for example a high-dimensional vector \vec{x} , or more generally when it is a field ϕ , with both spatial and temporal coordinates $\phi(\vec{r}, t)$. It is even harder when $V(\vec{r})$ also is defined statistically. For example, when the interaction between two particles in the system depends specifically on the two particles under consideration. In this later case we often say that the system is *disordered*.

In these general situations equation (1) may adopt the form of

a “Langevin-like equation”, i.e.:

$$\frac{d\phi(\vec{r}, t)}{dt} = F(\vec{r}, \phi(\vec{r})) + \eta(\vec{r}, t) = -\frac{\partial V(\vec{r}, \phi(\vec{r}))}{\partial \phi(\vec{r})} + \eta(\vec{r}, t) \quad (3)$$

where ϕ is a vector field, $F(\vec{r}, \phi(\vec{r}, t))$ is a general function that sometimes can be written as the derivative of a potential V that may depend on the coordinate \vec{r} and the field. As before, η plays the role of the noise. If the noise is absent we are in the presence of a deterministic equation for the field ϕ .

In what follows we explain how the work of Manabe, Hasselmann and Parisi can be cast within the above described framework and which were their main contributions to their respective fields of research.

II. CLIMATE MODELS OF THE EARTH

One half of the Nobel Prize in Physics of 2021 was awarded to Pr. Syukuro Manabe and Pr. Klaus Hasselmann. Their work is at the basis of our current knowledge of the Earth’s climate and the influence of humans on it.

II.1. Syukuro Manabe: Carbon Dioxide and Radiation Balance

Probably the *older* and at the same time *modern* model for climate dynamics was proposed by S. Arrhenius already in 1896 [3].

In short, the Earth receives energy from the Sun, and radiates energy as a black body. The atmosphere is an intermediate layer that mitigates the energy arriving from the Sun, and radiates to the empty space, and back to the Earth, the energy received from the Earth’s radiation.

This can be considered as the starting point for every model of Earth's climate. For example, the effects of CO₂ in the temperature of the Earth can be taken into account by changing the radiative properties of the layer representing the atmosphere. This was the approach followed by Manabe and Wetherald [4], in what is now considered for many as the most important paper in the history of climatology [5].

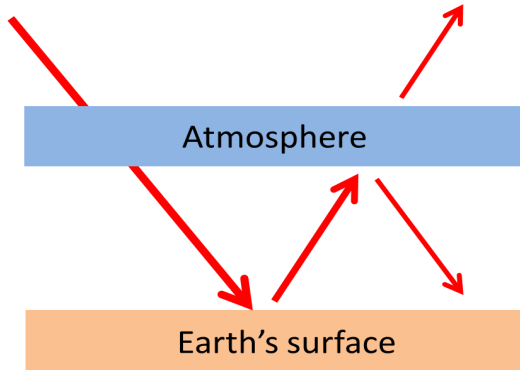


Figure 1. Arrhenius picture of the Earth climate. The Earth receives energy from the sun and radiates as a black body. The atmosphere, also radiates, to the Earth, and to the space.

For simplicity, they considered the layer representing the atmosphere as a vertical one-dimensional system on top of the Earth's surface –remember that, back in 1967, computers were not particularly powerful. This layer had the usual radiative properties, but they included on it, the effect of water vapor convection. This allowed them to trace the influence of the humidity profile of the atmosphere in the temperature. In practice it means that the temperature dynamics of the Earth would depend on two coupled equations, one for the temperature itself, and the other for the distribution of the humidity in the layer. To check the relevance of their model, they compared their results in two different cases: i) considering the actual concentration of specific gases in the atmosphere and ii) removing these gases. They found that the equilibration temperature of the Earth was larger in the first case.

With the knowledge that we have today on the Greenhouse effect, the result may look as expected, but it was not in 1962. Actually, it remained unnoticed for almost ten years, only to be now recognized as one of the first modeling approaches supporting the impact of mankind in the heating of the Earth.

More than 10 years later Manabe and Wetherald [6] published another breakthrough paper introducing a Global Climate Model (GCM) that included the dynamics of heat, mass, momentum and the radiation around the globe where again they studied the role of CO₂ on the Earth's temperature.

II.2. Klaus Hasselmann: Weather and Climate

If the GCM introduced by Manabe and collaborators can be considered as a deterministic theory for the fields (temperature, density of gases, water vapor, etc.) describing the dynamics of the Earth's climate, the work of Pr.

Hasselmann went a step further, coupling these equations –actually an abstract version of them– to the Earth's weather [7].

In Hasselmann's picture, the weather would act as a noise in the framework of Global Climate Models. Let us call c_i the variables describing the climate, as above, and w_i new variables that will describe the weather, also locally. Thus, in a very general way we can write:

$$\dot{c}_i = f_i(\vec{w}, \vec{c}) \quad (4)$$

$$\dot{w}_i = g_i(\vec{w}, \vec{c}) \quad (5)$$

$$(6)$$

The intuition is that w_i and c_i vary within different time scales. The weather variables, w_i change faster than c_i . Then, when studying the dynamics of the fast variables one can assume that the slow variables are constant. On the contrary, in the study of the dynamics of the slow variables, the fast variables can be substituted for their average values and some noise representing the fluctuations.

In short:

$$\dot{c}_i \approx f_i(\langle \vec{w} \rangle_{\vec{c}} + \vec{w}_{fluc}, \vec{c}) \quad (7)$$

where, $\langle \vec{w} \rangle_{\vec{c}}$ represents the average of the variable \vec{w} given the state of the climate, while \vec{c} and \vec{w}_{fluc} represent the fluctuations of the weather. Expanding the expression above, we get:

$$\dot{c}_i \approx f(\langle \vec{w} \rangle_{\vec{c}}, \vec{c}) + \frac{\partial f(\langle \vec{w} \rangle_{\vec{c}}, \vec{c})}{\partial \vec{c}} \vec{w}_{fluc} = -\frac{\partial V(\vec{c})}{\partial \vec{c}} + \sigma(\vec{c})\eta(t) \quad (8)$$

that takes the form of a Langevin-like equation, see equation (3). Within this picture the weather acts as a noise in the framework of Global Climate Models. The relevance of this work can not be overestimated, it brought to the models of the climate, all the machinery of the stochastic systems of differential equations.

But Hasselmann went farther. In a series of papers [8,9] that span almost 20 years he approached a similar but conceptually different problem. How to compare the results of the models with those of observation? The problem is specially difficult because both are prone to errors and fluctuations and are defined over spatial and temporal scales. Mathematically it can be defined starting from a regression equation:

$$\vec{c} = \mathbf{X}\vec{a} + \vec{w} \quad (9)$$

where \vec{c} represents the measurement of the fields for the climate, the matrix \vec{X} contains the estimate response patterns obtained from Global Climate Models and \vec{w} is usually a Gaussian noise reflecting the weather impact on the measurements. The goal is to obtain \vec{a} as a function of these *known* parameters. The vector \vec{a} indeed gives us information about the importance of the different variables \mathbf{X} in the measurement \vec{c} .

III. DISORDER

The second half of the Nobel Prize in Physics of 2021 was awarded to Pr. G. Parisi for his discovery of special types

of order in disordered systems. This discovery has found deep implications in fields as diverse as condensed matter, mathematics, biology, neuroscience and machine learning.

III.1. Giorgio Parisi and replicas

Giorgio's more original contribution to science –and there were many– can be introduced starting from the most celebrated model of Statistical Physics, the Ising model, whose Hamiltonian has the form:

$$H = -J \sum_{i,j} s_i s_j \quad (10)$$

where s_i and s_j are spins, and J represents an interaction. The corresponding equilibrium distribution has Boltzmann-like:

$$P(\{s\}) = \frac{e^{\beta J \sum_{i,j} s_i s_j}}{Z} \quad (11)$$

This equation is reminiscent of (2).

The physics of this model is quite well understood. Landau's mean field solution [10] provides a qualitative picture of the continuous phase transition from the paramagnetic phase at high temperatures to the ferromagnetic phase at low temperatures. Already in 1944 Onsager, with an unequal tour-de-force of mathematical physics, solved the problem in two dimensions. Later on, the celebrated Renormalization Group Theory for which Wilson was awarded in 1982 the Nobel Prize, provided the conceptual framework to understand and approach this and other models with continuous phase transitions.

Figure 2 provides a simple picture of the physics behind this model.

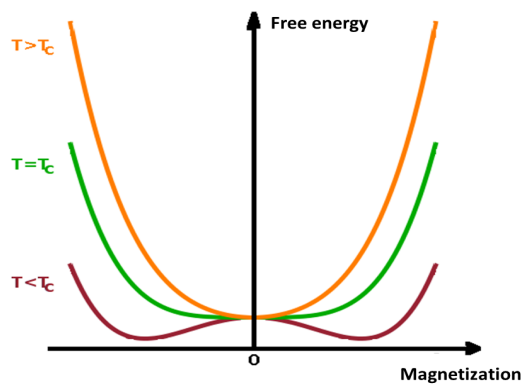


Figure 2. Landau's Free Energy for the Ising model.

At very high temperatures, the free energy has one minimum at zero magnetization, $m = 0$. Below a critical temperature T_c the system magnetizes spontaneously and at every temperature T the magnetization can be both positive ($m > 0$) or negative ($m < 0$). These two solutions correspond to the two minima of the Free Energy represented in Figure 2.

However, the presence of disorder in the Hamiltonian (10) may change dramatically the physics of the problem. Consider

for example when $H = -\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j$ where J_{ij} is 1 or -1, with probability 1/2. In Figure 3, we show a simple representation of the problem for 4 spins in a square lattice.

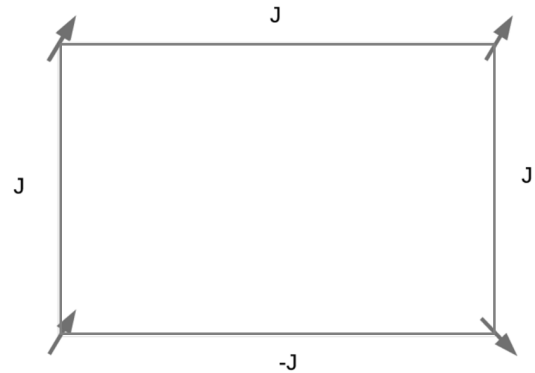


Figure 3. Four spins interacting in a frustrated square lattice. Notice that the right bond is not satisfied. The interaction is ferromagnetic, but the spins are oriented in opposite directions

Notice the impossibility to satisfy all the bonds at the same time. Independently on how we orient the spins, at least one of them is always unsatisfied. We call this phenomenon *frustration*, and is at the basis of the phenomenology behind what we now know as disordered systems. In these models it is hard –if not impossible– to minimize all the interactions between the elements, i.e., particles, spins, variables, of a system. In the case of the disordered Ising model presented above, the frustration arises as a result of the disorder, but in other models, like structural glasses, the frustration is a direct result of the dynamics of the model.

The picture emerging is summarized in Figure 4 where we sketch the kind of free energy landscape expected for this kind of models.

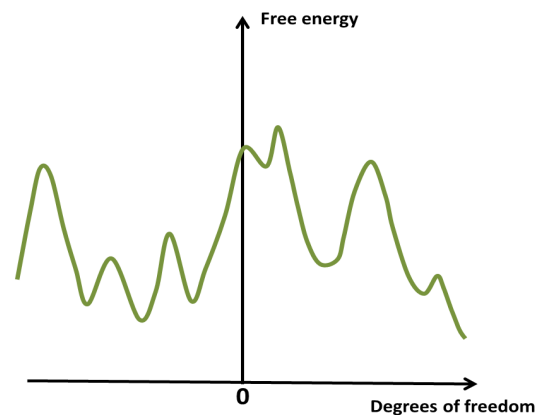


Figure 4. Schematic representation of the Free-Energy landscape for a frustrated system. The free energy is characterized by exponentially many minima.

The many minima, usually exponentially many, appear as a result of the frustration in the system.

To estimate the free energy of the problem one must compute:

$$F = -\langle \log \sum_s \exp^{\beta \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j} \rangle_J \quad (12)$$

where $\langle \dots \rangle$ indicates the average over the disorder. This average over a logarithmic function is a difficult operation and to deal with it one must resort to the replica trick $\log x = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n}$. With this trick, all the mathematical difficulty is enclosed into the average over the n -power of the partition function

$$\langle Z^n \rangle_J = \left\langle \sum_{s^n} \exp^{\beta \sum_a \sum_{ij} J_{ij} s_i^a s_j^a} \right\rangle_J \quad (13)$$

After a lengthy algebra necessary to compute 13 the average free energy (12) will depend on a complex order parameter Q_{ab} that encloses all the information about the solution structure of the system. The celebrated Parisi's solution to this problem was a clever and original proposal for the structure of this matrix [11, 12]. A picture representing it is shown in Fig 5.

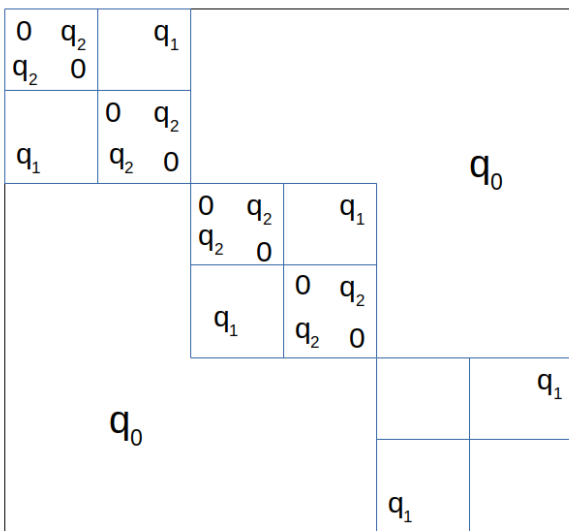


Figure 5. Schematic representation of the Parisi's ansatz, for the matrix $Q_{a,b}$. In its more general form it is parameterized by an infinite number of parameters q_0, q_1, q_2 , etc...

But Parisi went further, providing an interpretation for the elements of this matrix:

$$Q_{a,b} = \frac{1}{N} \sum_i \langle s_i \rangle_a \langle s_i \rangle_b \quad (14)$$

where a and b are replica indices, and $Q_{a,b}$ could be interpreted as the overlap of the states within different replicas. It turns out, that this is also a good representation of the properties of the states of the original system, such that:

$$P(q) = \sum_{a,b} w_a w_b \delta(q - Q_{a,b}) \quad (15)$$

where w_a and w_b represent the Boltzmann weights of the states a and b , and $P(q)$ is the disorder-average distribution of overlaps, and plays the role of the order parameter. Possible

forms of $P(q)$ appear in figure 6:

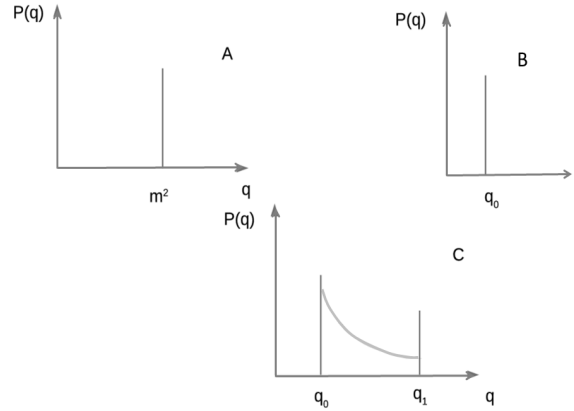


Figure 6. Order parameter $P(q)$ for different models A: Ferromagnet. B: Model with 1-Step Replica Symmetry Breaking. C: Model with a full Replica Symmetry Breaking solution

Although all this machinery reflects the solution of a mean-field model designed to study a rare material, it was soon discovered that it could be used in the study of many more systems. Combinatorial Optimization problems [13–15], Neural Networks [17], Granular Materials [16], Disordered Lasers [18], and more recently also interacting Metabolic Networks [19], are all problems that found in this approach a mathematical and conceptual framework testable in real experiments or in computer simulations.

IV. CONCLUSIONS

I must confess that, when the Editor asked me to write this article, I had some doubts. I was very familiar with Parisi's work, but I literally knew nothing about Earth's climate. I was even surprised by the combination of the names and fields of research involved in the Nobel Prize this year. While Parisi is an *all around* statistical physicist, with contributions that span over a wide range of fields, Climate Physics was not a subject in which he spent too much effort. The work of Manabe and Hasselmann is definitively at the foundation of our modern understanding of Earth's climate, but its connection with Statistical Physics was essentially circumstantial. However, after a couple of weeks reading intermittently the works of these climate scientists, and after reviewing the original works of Parisi, I think that I understand better the combination of names and the true meaning of this selection. Manabe devoted his efforts to build a proper theory of Earth's climate; he did so by introducing simple models, original ideas, but also advanced computational techniques. Hasselmann imported into Climate Physics important mathematical ideas previously developed in other fields. With their work, they contributed in a fundamental way to crack one of the most complex systems we know, *i.e.* Earth's climate. Furthermore, their work had important implications in our understanding of the impact of human kind in the planet. Parisi, on the other hand, devoted the last 30 years of his career to shed light into a large collection of problems from different fields

enclosing all of them within a single conceptual framework. In my opinion, these are the three scientifically sound ways to attack scientific problems. To increasingly improve the models describing them, keeping the physics/science comprehensible, to attack them by importing techniques developed in other fields, or to enlarge our understanding looking for concepts and techniques that could be shared by many of them at the same time. I am glad that the first Nobel Prize in Physics specifically awarding the study of Complex Systems embraces all these approaches.

REFERENCES

- [1] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, (3rd edition, Elsevier, 1996).
- [2] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, (3rd edition, Springer Series in Synergetics, 2004).
- [3] A. Arrhenius, *Phil. Mag.* **41**, 237-275 (1892).
- [4] S. Manabe and R. T. Wetherald, *J. Atmos. Sci.*, **24**, 241-259 (1967).
- [5] (see for example) <https://theconversation.com/the-most-influential-climate-science-paper-of-all-time-169382>.
- [6] S. Manabe and R. T. Wetherald, *J. Atmos. Sci.*, **32**, 3-15 (1975).
- [7] K. Hasselmann, *Tellus* **28**(6), 473-485 (1976).
- [8] K. Hasselmann, *Meteorology of Tropical Oceans*, (Edited by D.B. Shaw. London), pp. 251-259 (1979).
- [9] K. Hasselmann, *Clim. Dyn.* **13**, 601-613 (1997).
- [10] Kerson-Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd Ed (Taylor and Francis, 2002).
- [11] G. Parisi, *Phys. Lett. A* **73**, 203 (1979).
- [12] G. Parisi, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1754 (1979).
- [13] M. Mézard, G. Parisi, *Journal de Physique Lettres* **46** (17), 7710778 (1985).
- [14] M. Mézard, G. Parisi and R. Zecchina, *Science* **297**, 812 (2002).
- [15] R. Mulet, A. Pagnani, M. Weigt and R. Zecchina, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 268701 (2002).
- [16] G. Parisi and F. Zamponi, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 789 (2010).
- [17] A. Engel and C. Van den Broeck, *Statistical mechanics of learning*, (Cambridge University Press, 2001).
- [18] N. Ghofraniha, I. Viola, F. di Maria, G. Barbarella, G. Gigli, L. Leuzzi and C. Conti, *Nat. Commun.* **6**, 6058 (2015).
- [19] J. Fernández-de-Cossio-Díaz and R. Mulet, *Phys. Rev. E* **101** (4), 042401 (2020).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



FROM PILES OF GRAINS TO PILES OF VORTICES

DE LAS PILAS DE GRANOS A LAS PILAS DE VÓRTICES

E. ALTSHULER[†]Grupo de Sistemas Complejos y Física Estadística, Facultad de Física, Universidad de La Habana, 10400 Habana, Cuba; ealtshuler@fisica.uh.cu[†][†] corresponding author

Recibido 5/9/2021; Aceptado 18/11/2021

One of the most thrilling features of Physics is the possibility of establishing analogies between apparently distant areas. Here, we explain the parallel between a pile of grains interacting mechanically with each other, and a “pile” of superconducting vortices. In both cases the macroscopic slope of the pile is maintained by a very nonlinear avalanche process. Furthermore, both types of piles logarithmically relax in time due to “agitational” or thermal effects, aiming at a state of equilibrium.

Uno de los aspectos más apasionantes de la Física es la posibilidad de establecer analogías entre áreas aparentemente distantes entre sí. Aquí explicamos el paralelo entre una pila de granos que interactúan mecánicamente entre sí, y una “pila” de vórtices superconductores. En ambos casos la pendiente de la pila se mantiene mediante avalanchas altamente no lineales. Además, ambos tipos de pilas se relajan en el tiempo debido a efectos “agitativos” o térmicos, apuntando hacia un estado de equilibrio.

PACS: Avalanches (granular systems) (avalanchas (sistemas granulares)), 45.70.Ht; Vortex pinning (superconductivity), anclaje de vórtices (superconductividad), 74.25.Wx; Criticality, self-organized (criticalidad, auto-organizada), 05.65.+b; sandpile models (modelos de pilas de arena), 45.70.Cc

I. INTRODUCTION: FLUCTUATIONS AND DISORDER

It was perhaps Galileo who first realized that provocative titles are crucial to capture the attention of potential readers of science books. In *Dialogues concerning two new sciences* (1638) [1], he actually introduces two new disciplines: I might call them the science of motion, and materials science. The book is an undisputed masterpiece, so it is hard to criticize its somewhat pompous title. Curiously, the idea of titles announcing new sciences has become fashionable again these days. Judge by yourself: “*Sync: The Emerging Science of Spontaneous Order*” (2004) [2], “*Nexus: Small Worlds and the Groundbreaking Science of Networks*” (2003) [3], “*A New Kind of Science*” (2002) [4] and “*How Nature Works: The Science of Self-Organized Criticality*” (1996) [5]. The latter, written by the Danish physicist Per Bak, immediately attracted many followers as well as detractors. While there is consensus today that the book’s title is not a paradigm of objectivity, there is no doubt that the subject of Self-Organized Criticality (SOC) concentrated a lot of attention on granular matter by cleverly using the granular pile as a physical paradigm.

In any case, I believe that SOC strongly contributed to the incorporation of physicists to the study of sandpiles (and, in general, granular matter) [6–10], a subject almost exclusively tackled by engineers before the end of the XX century (See, for example, [11]).

However, you do not need Self-Organized Criticality to realize that the granular pile shown in Fig. 1 is extraordinary. And it is not because you rarely see a beautiful picture of a pile of drywood termite excrement: it is extraordinary just for being a pile. First of all, we must notice that most of its slope is straight, in spite of the fact that it extends for a length much larger than the size of the individual grains. How is it possible that grains, which only seem to interact when they are directly touching

their next neighbors, can organize themselves in such a large structure? Human beings can form almost perfect lines and nice platoons, but it is generally achieved by means of some kind of centralized organization that directly reaches many individuals at various distances from the center. But there is no such thing in a granular pile. In addition, if you form the pile by slowly adding grains from the top, its smooth slope results from landslides (or avalanches). You have also probably observed that the general shape of the pile is very robust: if you form a new pile on a table by dropping grains of the same kind from above you will reach approximately the same angle relative to the horizontal, even if you do not deliver them exactly in the same way. You will get the same robustness using beads, sand, termite excrement... It illustrates self-organization.



Figure 1. A pile of termite excrement. The width of the base of the actual pile is somewhat larger than 5 cm.

SOC proposes a mechanism where local interactions between neighboring grains are able to explain the emergence of a pile with straight slopes. The simplest computational way to work the idea out is known as the BTW model [12], illustrated in Fig. 2. We have a table on which we pour identical grains at random places, one by one. Then, we apply very simple rules trying to mimic the way a “real” pile becomes locally unstable. In the

digital world of the model, the grains cannot land everywhere, but just on 9 sites of a grid, arranged as illustrated in Fig. 2(a). If one site reaches a threshold of 4 grains, it is emptied out: each of the four grains moves to the neighboring sites located at the top, bottom, right and left relative to the initial one –that is called a toppling event.

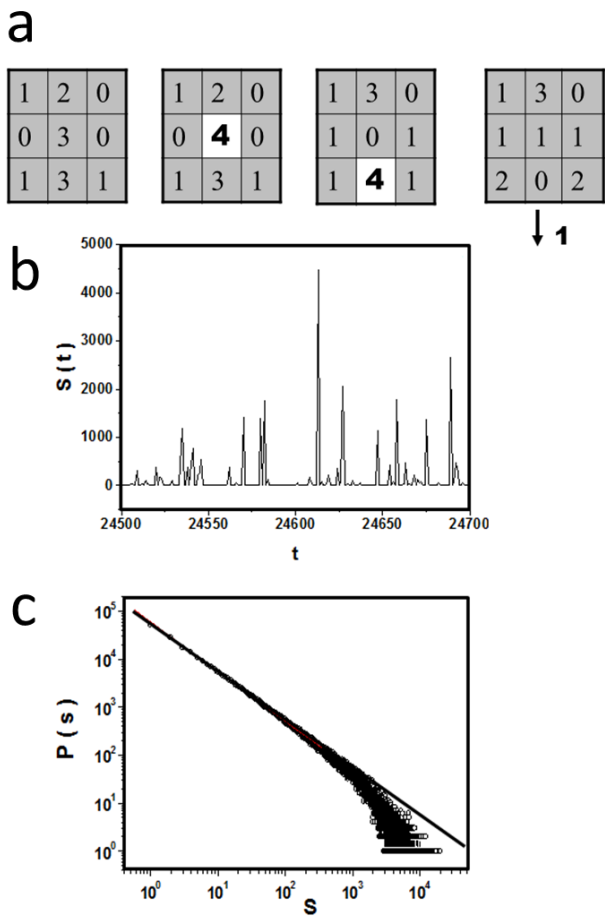


Figure 2. The BTW model in images. (a) evolution of an avalanche in a small system of 9 cells. (b) Temporal evolution of avalanches for a much bigger system. (c) Statistical distribution of avalanche sizes.

If, as a consequence of this action, any of these four sites reaches the threshold of 4 grains, the process repeats again, until all sites within the 9-site grid contain less than 4 grains. In the process, some grains may eventually abandon the 9-site region by crossing its boundary. Only when all toppling events are completed, a new grain is added to the system from the top. Adding grains is a patient and slow process; avalanches are unexpected and fast: the system is very nonlinear.

To illustrate these rules, the first graph at the left of Fig. 2(a) shows a “metastable moment” in the grid, where all cells contain less than 4 grains (the numbers correspond to the number of grains on each site). In the second graph, one grain has been added to the center cell, which makes it reach the 4-grain threshold. So, the next graph shows how the center cell has been reset to zero, because all grains have emigrated from it to the four neighboring sites, which accordingly have increased in 1 their number of grains. In the process, the bottom center cell has reached the 4-grain threshold, so the last graph indicates that it has been subsequently reset to zero, and

additional grains have been added to the cells located above it, and to its right and left a fourth grain had nowhere to go, and was removed through the bottom boundary of the table (If one averages the number of grains added to the grid from top over a long period, it must be equal to the average number of grains abandoning the grid through its border. But it does not mean that you have always one grain exiting when one grain is added: sometimes, many grains can be added and no grain abandons the system. . . and eventually you may add one grain, and a bunch of grains abandon the system).

Finally, the system is back in calm –all cells are below the threshold– so a new grain can be added from top. If we define an avalanche as the number of toppling events between one addition and the next, we have described here an avalanche of value 2 (you can define many types of avalanches, like the number of sites involved in toppling events and the number of grains that abandoned the system, called off-the-edge avalanches). Of course, we cannot go far with this 9-cell table: the graphs (b) and (c) in Fig. 2 illustrate results from a much larger system, studied for a much longer time. Fig. 2(b) shows the temporal evolution of avalanche sizes: the horizontal axis corresponds to the time, which is equivalent to the number of grains added from top in the BTW’s model; while the vertical axis corresponds to the avalanche size that we will call s . So, for example, we can identify an avalanche involving 2000 toppling events taking place when the grain number 24625 was added to the system. Looking at the whole graph, it seems that there are avalanches of many different sizes: no specific size seems to dominate. In fact, there could be avalanches involving the whole grid: somehow, short-range interactions between neighboring grains can involve the whole pile. Let us now sort the avalanches by size for a very long experiment: for example, we count 100 000 avalanches of size 1, 10 000 avalanches of size 10, 1000 avalanches of size 100, and so on. Then, we plot the results as shown in Fig. 2(c) (open circles), that we will call an avalanche size distribution (ASD). The fact that the plot decreases, indicates that large avalanches are rare, while small avalanches are common. Moreover, the data follows a power law (indicated as a solid line): $P(s) \propto s^{-\alpha}$. This kind of distribution indicates that, if you look the graph within any time window, it looks exactly the same: it is “fractal” in the time domain. For the particular case of the BTW model, the power law has $\alpha = 1$.

Another fundamental (and often forgotten) result from the BTW model is that it gives piles with nearly straight slopes, in spite of the fact that the toppling rules are “local”. So, this simple computational automaton tries to justify why grains that only interact with their next neighbors can produce macroscopic structures much larger than the grains themselves. Moreover, small changes in the rules of the BTW model still produce piles with straight slopes and power-law distributed avalanches. If, for a given set of the rules, the resulting power law shows a robust slope value, statistical physicists say they have discovered a new “universality class” (In real experiments, the value of may move within the range between 1 and 2). In other words, our slowly-fed digital piles are very robust in terms of shape, and that robustness is connected with a “slope-adjusting

mechanism” mediated by power-law distributed avalanches. The robustness can be connected to self-organization, and the power-law distribution reminds critical phenomena— an older and very successful field of Physics [13]. So Bak and co-workers called their idea “Self-Organized Criticality”. It is safe to say that no one minds too much the self-organization ingredient of the theory, but the Criticality part has been widely criticized. And for good reason: many early attempts to find power-law distributed avalanches in real piles did not show undisputable power laws.

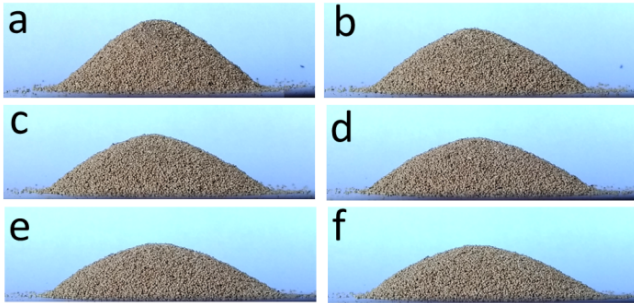


Figure 3. Relaxation of a pile of excrement. (a) Original pile. (b), (c), (d), (e) and (f) are images of the piles after 1, 2, 3, 4 and 5 taps, respectively.

Some of those early experiments were made in a rush, inspired by the BTW model, and used various avalanche definitions. It was not clear if the comparison between the resulting avalanche distributions and those generated by BTW-like models were rigorous enough. For example, one of those experiments consisted in slowly pouring sand on the circular plate of a very precise digital scale, and measuring the variations in the pile’s mass. Those avalanches were only related to grains falling off the plate: They mimicked best “off the edge” events like the one illustrated in right picture of Fig. 2(a). In fact, one cannot expect a true power law for the statistical distribution of those avalanches. Other experiments involving avalanche definitions closer to the BTW model were performed on piles that were too small to produce trustable statistical distributions of avalanche sizes: the existence or not of a power law could only be assessed by careful manipulations of experimental data related to finite size scaling.

However, carefully controlled experiments in bi-dimensional piles of beads have shown that the avalanches are indeed distributed following a nice power-law, with a slope [14, 15]. As an extra benefit, being the slope larger than 1, it can be argued that there exists the possibility of predicting the occurrence of a large avalanche based on the previous history of avalanches —a controversial idea that might be applied to earthquakes, another phenomenon consisting in “tectonic plate slippages” distributed as a power law [16].

The BTW model proposes an avalanche-like mechanism by which a granular pile reaches a meta-stable state with nice straight slopes as it is slowly fed with new grains. However, it does not deal with the problem of how a static pile reaches the true equilibrium. In order to make the pile relax into a stable equilibrium state, we may apply the method shown in Fig. 3. There, panel (a) shows a picture of a termite excrement pile formed by slowly adding grains from top. The pile has

been formed on the surface of a cardboard box, which visibly vibrates as it is finger-tapped. The second, third... sixth pictures shown in Fig. 3 correspond to the original pile after applying one, two... five taps on the cardboard. Notice that the slope of the pile decreases very slowly. Common sense indicates that, after an infinite number of taps, the pile would become completely flat, reaching a state of stable equilibrium. When a rigorous experiment is performed, it can be shown that the slope of the pile decreases logarithmically with the number of taps [17].

One of the most thrilling possibilities in science is establishing analogies between fields that are apparently very far away from each other. Here we have one of those beautiful examples: as in the case of the tapped granular pile, magnetization also relaxes logarithmically in the case of superconductors as time goes by. Type II superconductors are peculiar materials that do not allow magnetic fields to penetrate them... up to a certain point. If the magnetic field reaches the so-called “first critical field”, a compromise is established between the magnetic field that “wants to penetrate the material” and the material, who “doesn’t want to be penetrated”: the field gets in, but not flooding it as a continuum. It enters as tiny field-containing spots surrounded by current swirls called Abrikosov vortices [18]. Two forces compete in the penetration process. On the one hand, vortices repel each other at short distances —just as grains of sand repel each other when they collide. Thanks to that, as the external field eagerly “pushes” the vortices in through the materials’ boundary, the vortices push each other inside —just as the gravitational force make grains move down the slope of a pile. On the other hand, non-superconductive defects in the superconductor (called “pinning centers”) tend to “trap” the vortices, acting as a barrier against their penetration —in the case of grains, they are locally trapped into little bumps on the surface of the pile, preventing them to roll all the way down. The competition between the two effects results in a “vortex pile” where the vortex density is large near the borders of the materials, and decays towards the center, forming a straight slope. It is analogous to slowly filling a shoebox with grains of sand from its borders [19, 20]. If we stop adding grains and the shoebox is shaken, the granular slopes will relax inside the box. The same happens with our microscopic vortices, but the role of shaking is played by the agitation associated to conventional temperature: the vortex pile slope will decrease slowly in time, resulting in a logarithmic relaxation of the magnetization —which is just a macroscopic way to measure it. Curiously, this effect —called flux creep— was studied in detail years before granular relaxation for conventional superconductors [21], and then for high temperature superconductors [22–24], in spite of the fact that it requires the use of relatively sophisticated equipment and cooling systems.

In principle, one could modify the rules of the BTW model in order to understand relaxation, but now I prefer good old-fashioned statistical physics. The top left panel of Fig. 4 sketches the slope of a granular pile at the very moment the tapping starts. At the right, I show the corresponding “washboard” potential landscape, where grains are trapped

into potential wells, which mimics the trapping of grains at the irregularities of the pile's surface.

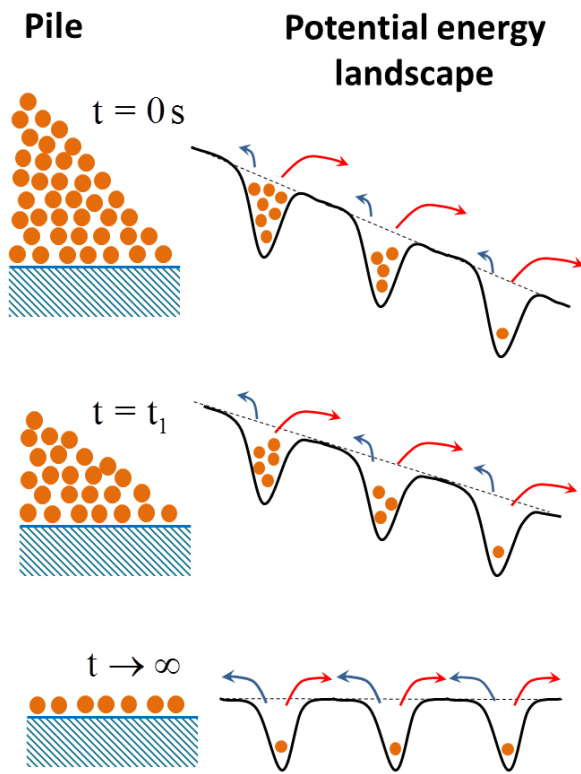


Figure 4. Jumping out of the well. A classical "washboard potential" model useful to understand the relaxation of piles of grains or superconducting vortices.

The overall inclination of the washboard potential is proportional to the difference in the number of grains trapped into adjacent wells. Due to the taps, the grains may eventually escape from the potential wells: they have a large probability to escape downhill (red arrows), and a smaller one to escape uphill (blue arrows). The second row in Fig. 4 is analogous to the first one, but after the application of a certain number of taps. The net downhill motion of grains has reduced the slope of the pile and, correspondingly, the slope of the washboard potential. The smaller inclination implies that the probability to escape downhill is smaller than before, while the probability to escape uphill is larger than before: that implies that the net downhill motion is smaller, and the inclination process is slower. After an infinite number of taps we get to the bottom row in Fig. 4, where the washboard potential has become horizontal, and the probabilities to escape uphill and downhill are identical: there is no net granular motion. So, the system has reached equilibrium, and the washboard potential stops evolving. My description can be put in mathematical terms using the methods of classical statistical mechanics where the taps mimic an "effective temperature", which allows to demonstrate that the slope of the pile decreases logarithmically as the number of taps (i.e., as the time) increases. A similar model can be used for the case of superconducting vortices, resulting in a logarithmic decrease of magnetization [25], and potentially explains a phenomenon

that occurs in magnetic materials called "magnetic viscosity" [26].

By the beginning of the 1990's I was familiar with superconducting vortex physics: our group systematically made relaxation experiments, for example. Then, I discovered the BTW model for a pile of grains, which motivated me to search for avalanches in vortex systems. Over the years, I concentrated more and more on avalanches and relaxation of granular matter. All in all, a beautiful analogy between distant fields of Physics has modulated my scientific career for decades. It has been a joyful trip.

REFERENCES

- [1] G. Galilei "Discorsi e Dimostrazioni Matematiche, intorno à due nuoue science" (Elzevir, Leiden, 1638).
- [2] S. Strogartz, "The Emerging Science of Spontaneous Order" (Penguin Press Science, 2004).
- [3] M. Buchanan "Nexus: Small Worlds and the Groundbreaking Science of Networks" (W. Norton & Company Preprint edition, 2003).
- [4] S. Wolfram "A New Kind of Science" (Wolfram Media, 2002).
- [5] P. Bak "How Nature Works: The Science of Self-Organized Criticality" (Copernicus, Springer-Verlag, 1996).
- [6] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, R. P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259 (1996).
- [7] P. G. de Gennes, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S374 (1999).
- [8] E. Altshuler, O. Ramos, E. Martínez, A. J. Batista-Leyva, A. Rivera, K. E. Bassler, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 014501 (2003).
- [9] E. Martínez, C. Pérez-Penichet, O. Sotolongo-Costa, O. Ramos, K. J. Måløy, S. Douady, E. Altshuler, *Phys. Rev. E* **75**, 031303 (2007).
- [10] E. Altshuler, R. Toussaint, E. Martínez, O. Sotolongo-Costa, J. Schmittbuhl, K. J. Måløy, *Phys. Rev. E* **77**, 031305 (2008).
- [11] H. A. Janssen, *Zeitschr. d. Vereines deutscher Ingenieure* **39**, 1045 (1895).
- [12] P. Bak, Ch. Tang and K. Wiesenfeld "Self-Organized Criticality: An Explanation of 1/f Noise" (*Physical Review Letters* **59**, 381, 1987).
- [13] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher and M. E. J. Newman "The theory of critical phenomena: An Introduction to the Renormalization Group" (Clarendon Press, 1992).
- [14] E. Altshuler, O. Ramos, C. Martínez, L. E. Flores, C. Noda *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5490 (2001).
- [15] O. Ramos, E. Altshuler and K. J. Måløy, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 078701 (2009).
- [16] B. Gutenberg, C. F. Richter, *Annali di Geofisica* **9**, 1 (1956).
- [17] H. M. Jaeger, Chu-Cheng Liu, S. R. Nagel, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 40 (1989).
- [18] G. Blatter, M. V. Feigelman, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, V. M. Vinokur, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994).
- [19] E. Altshuler, T. H. Johansen, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 471 (2004).

- [20] E. Altshuler, T. H. Johansen, Y. Paltiel, Peng Jin, K. E. Bassler, O. Ramos, Q. Y. Chen, G. F. Reiter, E. Zeldov, C. W. Chu, *Phys. Rev. B* **70**, 140505 (2004).
- [21] Y. B. Kim, C. F. Hempstead, A. R. Strnad, *Phys. Rev.* **131**, 2486 (1963).
- [22] Y. Yeshurun, A. P. Malozemoff, A. Shaulov, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 911 (1996).
- [23] E. Altshuler, R. Cobas, A. J. Batista-Leyva, C. Noda, L. E. Flores, C. Martínez, M. T. D. Orlando, *Phys. Rev. B* **60**, 3673 (1999).
- [24] A. J. Batista-Leyva, R. Cobas, M. T. D. Orlando, E. Altshuler, *Supercond. Sci. Technol.* **16**, 857 (2003).
- [25] C. W. Hagen, R. P. Griessen, E. Salomons, *Physica C* **157**, 199 (1989).
- [26] J. A. Ewing *Proc. R. Soc. London* **46**, 269 (1889).

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0, <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) license.



“FÍSICAMENTE HABLANDO”: UN UNIVERSO EN EXPANSIÓN

No.	Autor y trabajo	Premio	modalidad
GRAN PREMIO			
1	Cristina Díaz Faloh (FF-UH) “¿Por qué se puede ver a través del vidrio?”	Gran Premio del Concurso (compartido)	Escrito
2	José Rafael Rodríguez (FQ – UH) “Tensión superficial”	Gran Premio del Concurso (compartido)	Video
Trabajo escrito			
3	Mario Antonio Rodríguez Díaz (Biología, UH) “Brisas de ingenio”	Primer premio	Escrito
4	Daniela Isabel Maldonado Bauzá (Biología, UH) “¿El caos tiene forma de alas?”	mención	Escrito
5	Egla Águila Gamboa (AyL – UH) “Conozcamos el efecto Marangoni”	mención	Escrito
6	Boris Luis Ramos Luis (FF-UH). “Colores, algo más que solo estética”	mención	Escrito
7	Daniela Lobaina Castillo (Instec) “El peso del aire y los ciclones”	mención	Escrito
8	Alexander Pérez Cabrera (Colegio Universitario) “Los números de Hubble, ¿Cómo se expande el Universo?”	mención	Escrito
9	Adrián Jesús García Llanes (FF-UH) “El arte de caminar”	mención	Escrito
Infografía			
10	Nayani Maroto Chang (Ing. Agrónoma Universidad de Cienfuegos) “Descubrimiento del radio”	Primer premio	Infografía
11	Boris Luis Ramos Luis “¿Has oído hablar de María Curie?”	mención	Infografía
Video			
12	Randy Becerra Rodríguez (Ing. Eléctrica, CUJAE) “Diferencia entre rayo, relámpago y trueno”	Primer premio	Video

Trabajos premiados en la segunda edición de “Físicamente hablando”.

La segunda Edición del Concurso de Divulgación Científica “Físicamente Hablando” se llevó a cabo entre los meses del septiembre y octubre de 2021, dando continuidad a una exitosa primera edición, idea surgida en medio de la pandemia en 2020.

La primera edición se dirigió solo a estudiantes de la Universidad de La Habana, en la categoría trabajo escrito. La segunda se convocó a nivel nacional para todos los estudiantes universitarios sin distinción de carreras, y contó con trabajo de diversas universidades y perfiles de estudio. Además del trabajo escrito, se aceptaron obras en dos categorías más: videos de 1 minuto de duración máxima, e infografías. Se recibió un total de 32 trabajos de 30 autores. De ellos, 21 fueron presentados en modalidad escrita, 5 como videos y 6 como infografías.

El jurado estuvo compuesto por los profesores titulares Dra. María Teresa Pérez Maldonado, Dr. Arbelio Pentón Madrigal y Dr. Ernesto Altshuler Álvarez.

Se otorgó una Gran Premio compartido a los estudiantes Cristina Díaz Faloh (Facultad de Física, Universidad de La Habana) y José Rafael Rodríguez (Facultad de Química, Universidad de La Habana), en los formatos de trabajo escrito y de video, respectivamente. Para cada categoría se confirmó un Primer Premio y se otorgó un total de siete menciones. La Tabla adjunta resume todas las premiaciones. Felicitamos a los participantes por su entusiasmo y talento.

Dra. Aime Peláiz-Barranco,
Decana, Facultad de Física,
Universidad de La Habana

AÚN EN PLENA PANDEMIA: DOS NUEVOS DOCTORADOS



Defensa doctoral de Edwin Rodríguez-Horta, el 29 de septiembre de 2021.

Aún en medio de los azotes de la pandemia en Cuba, se defendieron exitosamente dos doctorantes del patio. De la Universidad Central de Las Villas (UCLV), Noel Pérez-Díaz defendió exitosamente, el 30 de junio de 2021, la tesis “Habitabilidad durante episodios catastróficos y en ambientes extremos”, tutorada por los doctores Osmel Martín González y Jesús Martínez Frías, ambos de la UCLV. Por su parte, el 29 de septiembre de 2021, Edwin Rodríguez-Horta defendió la tesis “Física estadística inversa y correlaciones filogenéticas en datos biológicos”, tutorada por los doctores Roberto Mulet-Genicio y Alejandro Lage-Castellanos, todos de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. Como parte de la investigación vinculada a la tesis, Edwin resultó coautor del primer artículo firmado por un físico cubano en la prestigiosa revista Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS): en él se reporta un importante avance en la comprensión de la interacción entre genes del SARS-CoV-2.

LA TWAS ELIGE COMO FELLOW A NUESTRO EDITOR

A principios de Noviembre de 2021 se dio a conocer por medios nacionales^{1,2,3} e internacionales^{4,5} que Ernesto Altshuler, Doctor en Ciencias de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana fue elegido como miembro de la Academia Mundial de Ciencias (Twas por sus siglas en inglés), junto a otros dos profesionales cubanos. Esta distinción constituye un reconocimiento a su extensa labor científica, respaldada por trabajos pioneros que han impulsado varias disciplinas de la física.

El texto literal publicado⁶ menciona los méritos que avalan esta honorable membresía: “The nominee has performed scientific research in the field of physics and its applications to materials science and biology since the early 1980’s, when he was an undergraduate student at the Physics Faculty, University of Havana. He has worked and published in the field of magnetic materials, superconductivity, granular matter, pharmaceutical uses of porous materials, ant dynamics, and bacterial motion. He has produced

seminal work in the field of the current transport through inhomogeneous superconductors, avalanche dynamics in type-II superconductors and granular piles, the collective behaviour of panicked ants, and “super-contamination” of Escherichia coli bacteria. He has also made substantial contributions to the field of drug incorporation into porous materials, upstream contamination in flows, and other miscellaneous subjects. Most of his work is based on experiments, and most of them have been made in his home country, Cuba. Being a member of the Cuban Academy of Sciences (ACC), he has received the TWAS-ACC Award for the Best Young Researcher in the Natural Sciences, around a dozen Annual Awards of the Cuban Academy of Sciences and more than 50 scientific awards by the University of Havana.”

Muchas felicidades al nuevo Fellow de la TWAS por este logro, que a la vez enaltece el nivel y la calidad de la Física cubana.

Evelio Ramírez-Miquet,
Editor Asociado

¹<https://www.citma.gob.cu/10-cubanos-miembros-de-la-academia-mundial-de-ciencias/>

²<http://www.cubadebate.cu/noticias/2021/11/02/los-cubanos-gerardo-guillen-y-ernesto-altshuler-fueron-elegidos-miembros-de-la-academia-mundial-de-ciencias/>

³<http://www.juventudrebelde.cu/ciencia-tecnica/2021-11-02/academia-mundial-de-ciencias-tiene-nuevos-miembros-cubanos>

⁴<https://twnews.co.uk/cu-news/los-cubanos-gerardo-guillen-y-ernesto-altshuler-fueron-elegidos-miembros-de-la-academia-mundial-de-ciencias>

⁵<https://today.in-24.com/News/540230.html>

⁶<https://twas.org/article/twas-elects-58-new-fellows>

T. JACINTO CHUY RODRÍGUEZ
(21 de diciembre de 1947 - 5 de agosto de 2021)



Tomás Chuy (21 de diciembre de 1947 – 5 de agosto de 2021).

En la madrugada del 5 de agosto de 2021, víctima de la COVID-19, ha fallecido Tomás Chuy. Las obras de los hombres de ciencia no siempre tienen un eco en lo cotidiano, pero hay científicos que han trabajado toda su vida por el bienestar y la seguridad de los cubanos. Él se preocupaba, junto a sus colegas del CENAIIS, de crear los conocimientos necesarios para reducir las vulnerabilidades ante la eventual ocurrencia de un sismo fuerte en Cuba.

Con este propósito, su vida dejó un legado importantísimo para la sismología de Cuba, que lo califica entre los imprescindibles. Elaboró una base de datos de los sismos históricos de la cual todos los científicos de la Tierra hemos hecho uso. Preparó uno de los primeros mapas de peligro sísmico de Cuba, utilizando como criterio la clasificación del territorio según la mayor intensidad esperada de acuerdo a los datos históricos, y elaboró mapas detallados del peligro sísmico de algunas ciudades del país: especialmente, junto

a otros colegas, de la ciudad de Santiago de Cuba. Además, elaboró estudios de eventos, lo cual es muy importante en la geofísica forense. También elaboró materiales docentes y divulgativos para elevar la percepción del riesgo sísmológico entre los cubanos. Esa y muchas otras tareas lo harán quedar con todo honor entre los científicos que desarrollaron las bases de la sismología cubana.

Doctor en Ciencias Geofísicas 2000, poseía 46 años de experiencia en su especialidad de las Ciencias Sismológicas. Por su destacada trayectoria había recibido un sin número de reconocimientos como la Orden “Carlos J. Finlay” en el 2006, la Medalla “Jesús Menéndez” en el 2012, la Orden “Lázaro Peña de 1er Grado” en el 2018, Premio Andrés Poey, “Hazaña Laboral” en el año 2000, la Distinción “Juan Tomás Roig” en el 2004, y miembro emérito de la Sociedad Cubana de Geología desde el 2009 que le otorgó el premio “Vida y obra Francisco de Albear” en el 2013.

Varias generaciones de físicos lo recuerdan por su excelencia como investigador, pero también como persona sencilla, afable, disciplinada y rigurosa en el cumplimiento de sus tareas. Triste y dolorosa noticia para la comunidad de profesores y científicos santiagueros que lo recordarán también por su humildad, sinceridad y profesionalidad. En el momento de su deceso estaba propuesto para ser Héroe de la República de Cuba.

Llegue nuestro más profundo y sentido pésame a sus familiares, amigos, compañeros, y en especial, a los trabajadores del Centro Nacional de Investigaciones Sismológicas de Santiago de Cuba.

M. Iturralde,
Academia de Ciencias de Cuba

E. VEGA

(16 de febrero de 1944 - 15 de agosto de 2021)

Enrique Vega (16 de febrero de 1944 – 15 de agosto de 2021).

El 15 de agosto del presente año, falleció en Gijón, España, el Ingeniero Enrique Vega, quien perteneció durante varias décadas al claustro de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. Sirva este breve resumen de su actividad profesional en esta institución como humilde homenaje a su trabajo. El Ingeniero Enrique Vega, más conocido afablemente como Kike por sus compañeros de trabajo, se graduó de Ingeniería Electrónica en el Instituto Superior Tecnológico “José Antonio Echeverría” y se incorporó a la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, a principios de la década de los 70, formando parte del Grupo de Diseño Electrónico, dirigido por el Ing. José Quintero y cuya misión era el desarrollo y la construcción de equipos electrónicos especializados para los laboratorios de investigación de la Facultad de Física y otras instituciones de la UH. Allí colaboró exitosamente con otros ingenieros y técnicos integrantes del grupo, en numerosos trabajos de desarrollo electrónico, hasta la extinción del mismo en la

década de los 80. Al mismo tiempo se incorporó desde el principio al trabajo docente, mediante su participación en las labores del colectivo de la disciplina Electrónica, perteneciente al Dpto. de Física General, dentro del cual impartió clases prácticas y sesiones de laboratorio hasta su retiro en 2006. Siempre se destacó por su excelente relación con los alumnos y por su preocupación por aquellos que presentaban problemas docentes con la disciplina. Con frecuencia ofrecía sesiones de aclaración de dudas, fuera de toda programación oficial. Sus aportes principales en la actividad docente fueron, en primer lugar, la elaboración de varias colecciones de problemas de electrónica analógica y digital con sus correspondientes soluciones numéricas y la comparación con lo obtenido mediante el uso de software de simulación electrónica, lo que en su época y en nuestro entorno, representó una innovación avanzada. Estas guías estuvieron en uso durante muchos años en las clases prácticas de la disciplina. En segundo lugar, realizó una intensa labor en el desarrollo de prácticas de laboratorio, esforzándose por mantenerlas razonablemente actualizadas en correspondencia al desarrollo de la tecnología electrónica. Como complemento, colaboró en la redacción de las varias ediciones de las guías de laboratorio, para también mantenerlas actualizadas. Por último y para completar su espectro de tareas, formó durante años parte del Comité Sindical Universitario y se desempeñó al frente del órgano de justicia laboral. Todos éramos conscientes de que Kike padecía de serios problemas de salud, vivía lejos del centro de La Habana, y cuidaba de una madre anciana. Sin embargo, con frecuencia era el primero en llegar al laboratorio y el último en irse. Su relación con los compañeros de trabajo, siempre fue excelente, siendo una persona muy afable y receptiva a las opiniones de los demás. Descansa en paz, Kike.

M. H. Calviño,
 Profesor Invitado,
 Universidad Autónoma de Zacatecas,
 México

J. RAVELO TRIANA*(25 de noviembre de 1930 - 27 de agosto de 2021)*

Justo Ravelo Triana (25 de noviembre de 1930 – 27 de agosto de 2021).

El 27 de agosto de 2021 falleció en La Habana el Maestro en Ciencias Justo Ravelo Triana. Había nacido en Güines el 25 de noviembre de 1930.

Graduado de nivel medio como Técnico Mecánico Instrumentista, laboró en esta especialidad de 1951 a 1961 en la Cervecería Modelo SA. De 1951 a 1958, fue activista del movimiento sindical y participó en actividades clandestinas del Movimiento 26 de Julio, lo que sirvió de aval para su membresía en la Asociación de Combatientes de la Revolución Cubana.

En 1961 se incorporó al primer grupo de becarios cubanos que cursaría estudios superiores en la antigua URSS. Entre 1962 y 1967, estudió en la Facultad de Física de la Universidad Estatal Bielorrusa V.I. Lenin, en la especialidad de Radiofísica y Electrónica. Sus brillantes resultados académicos le llevaron a formar parte del Cuadro de Honor de la facultad, en el que permaneció durante 3 años: en uno de ellos, resultó ser el mejor estudiante integral de la facultad, reconocimiento extraordinario en una Universidad integrada en su mayoría por estudiantes nativos.

Al regresar a Cuba, se incorporó a trabajar en el ICRT. Laboró como ingeniero de audio en esa institución de 1967 a 1968. En 1968 fue escogido como parte del equipo fundador del Instituto de Física Nuclear (IFN), posterior Instituto de Investigaciones Nucleares (ININ) de la Academia de Ciencias de Cuba, grupo con el que viajó a la URSS ese mismo año, para cursar estudios de posgrado en Física Nuclear Experimental en la Universidad Estatal "Lomonósov", de Moscú. Al concluir estos estudios, se integró a las tareas iniciales de organización, instalación de laboratorios, preparación de personal, etc., que demandaba el IFN. Posteriormente, participó en la definición de líneas temáticas y objetivos científicos, así como en la elaboración de programas de estudios de maestría para los egresados de

universidades cubanas. Entre 1974 y 1975, su resultado más relevante fue el desarrollo de un Espectrómetro Mössbauer de baja resolución.

Durante 1977, entre las Academias de Ciencias de Cuba y la URSS se acordó la creación en Cuba de un centro de I+D dedicado al desarrollo de aparatos y técnicas especiales, útiles a la investigación científica de vanguardia. Este centro, orientado a realizar investigaciones físico-técnicas y desarrollo de aparatos hasta su producción en pequeñas series experimentales, fue creado a fines de 1977 con el nombre de BECICPA (Buró Especial de Construcción de Instrumentos Científicos con Producción Adjunta). En 1978, Justo Ravelo se incorpora al grupo fundacional de dicha institución como subdirector encargado de la creación de las bases tecnológicas (talleres de maquinado, áreas de desarrollo en electrónica, mecánica, etc.) y los laboratorios de investigación en óptica, optoelectrónica y técnica laser, entre otros. Para el exitoso cumplimiento de esta tarea le sirvió su experiencia como instrumentista industrial y su sólida formación teórica y experimental como radiofísico.

Tuvo un rol decisivo en la creación de la sede temporal del centro, que se ubicó en La Habana Vieja, en el antiguo colegio de Belén, donde se montaron talleres mecánicos, laboratorios electrónicos, áreas de proyecto y tecnología mecánica, y los laboratorios de óptica y optoelectrónica con bancos y mesas ópticas y una mesa interferométrica. Adicionalmente, atendió el proceso inversionista de lo que sería la sede definitiva de la institución al este de la Habana.

Debido a dificultades en las negociaciones con la Academia de Ciencias de la URSS para el suministro del equipamiento tecnológico de la sede definitiva, demoras en los planes inversionistas y como las facilidades temporales estaban creadas, la dirección del BECICPA decidió liberarlo de sus responsabilidades como subdirector y destinarlo al trabajo investigativo a tiempo completo. En 1983-84 se incorpora al trabajo en el desarrollo de un polarímetro digital magneto-óptico de aplicación en investigaciones sucroquímicas, y en la industria azucarera nacional como instrumento metrológico. En 1987 el BECICPA cambia su nombre por el de CEDEIC (Centro de Desarrollo de Equipos e Instrumentos Científicos). En 1985, Justo se incorpora al desarrollo de un elipsómetro láser automático para su uso en la industria electrónica, en estrecha colaboración con el Instituto "Ioffe" de Leningrado (hoy San Petersburgo). El diseño y construcción del elipsómetro fue galardonado por la Academia de Ciencias de Cuba como resultado destacado de la Actividad Científico-Técnica Nacional durante el año 1989. Los resultados de estos trabajos están recogidos en un número considerable de publicaciones y en su participación como coautor de 2 patentes.

Luego de la integración del CEDEIC con el Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN),

Justo continuó trabajando como Investigador Auxiliar y participó activamente en el desarrollo de programas de ajuste y puesta a punto de los polarímetros automáticos LASERPOL, así como el control metrológico de los mismos, y desarrolló un prototipo de polarímetro automático con analizador rotatorio. Logró gran reconocimiento de la comunidad de ópticos cubanos y de otros países por su destacada labor como secretario ejecutivo de los eventos TECNOLASER, organizados por el CEADEN y otras instituciones, que estuvieron enfocados en destacar las actividades que se realizan en Cuba y el resto del mundo en el campo de la tecnología láser, óptica y afines, los que

se celebraron en 1997, 2000, 2003, 2005, 2007, 2009 y 2012. Integró la Sociedad Cubana de Física desde 1984 hasta su fallecimiento.

Justo Ravelo será recordado como ejemplo de sencillez, dedicación incondicional al trabajo y elevada competencia profesional, siempre dispuesto a ayudar a quien se le acercara.

R. A. Díaz Delgado

J. L. Díaz Morera

V. L. Fajer Ávila

M.D. GONZÁLEZ-POSADA DACOSTA
(14 de octubre de 1957 - 1 de septiembre de 2021)



Mario Damián González-Posada Dacosta (14 de octubre de 1930 – 27 de septiembre de 2021).

Mario Damián González-Posada Dacosta nació en Cienfuegos el 14 de octubre de 1957 y falleció el pasado 1ro de septiembre en Bayamo. Estudió en la Universidad de Oriente donde se graduó de Licenciado en Física con especialidad en Física Nuclear. Luego de culminar sus estudios de pregrado se incorporó en 1981 al claustro del Departamento de Física del Instituto Superior de Ciencias Agropecuarias de Bayamo (ISCAB) hoy Universidad de Granma) en 1981.

A la par de sus responsabilidades docentes demostró una gran capacidad de adaptación para desarrollar proyectos de investigación innovadores en el campo de la Física de Suelos en una institución superior de perfil agropecuario. Mario Damián González-Posada Dacosta, junto a investigadores de la Universidad Agraria de La Habana y del Instituto

Nacional de Riego y Drenaje, estuvo dentro de los pioneros en la aplicación de Métodos Geoestadísticos para el análisis espacial de datos geoelectrónicos provenientes de suelos afectados por sales. Defendió con éxito en 2001 su tesis doctoral titulada "Optimización de la cartografía a escala detallada de la salinidad en suelos del valle del Cauto" bajo la dirección del Dr. C. Julián Herrera. Fue uno de los autores principales del colectivo que obtuvo el Premio Nacional de la ACC en el 2009 y el Premio Nacional Especial del CITMA en el 2010.

Fue coautor de varios artículos publicados en revistas de alto estándar como Geoderma 109(1-2):75-83, 2002; Geoderma 117(1):117-128, 2003; Geoderma 125(1):23-38, 2005, Geoderma, 138(3):185-190, 2007; Soil and Tillage Research 110: 77-86, 2010 y Soil and Tillage Research 120 (76-84), 2012. Esto da fe de su entusiasmo por la Ciencia No Lineal, fundamentalmente la geometría de estructuras fractales y multifractales y sus aplicaciones al sistema suelo-planta-agua-atmósfera.

Mario Damián González-Posada Dacosta también cumplió con eficiencia cargos administrativos. Como Decano de la Facultad de Informática fue muy querido y respetado por estudiantes y profesores. En el momento de su fallecimiento se desempeñaba como Vicedecano de Investigación y Postgrado de la Facultad de Ciencias Técnicas de la Universidad de Granma. Siempre lo recordaremos por su disposición a ayudar sobre todo a los profesores jóvenes, su gran capacidad de trabajo y su interés por los nuevos avances en nuestra ciencia.

H. E. Millán Vega
Dpto. Física, Matemáticas e Informática,
Universidad de Granma

