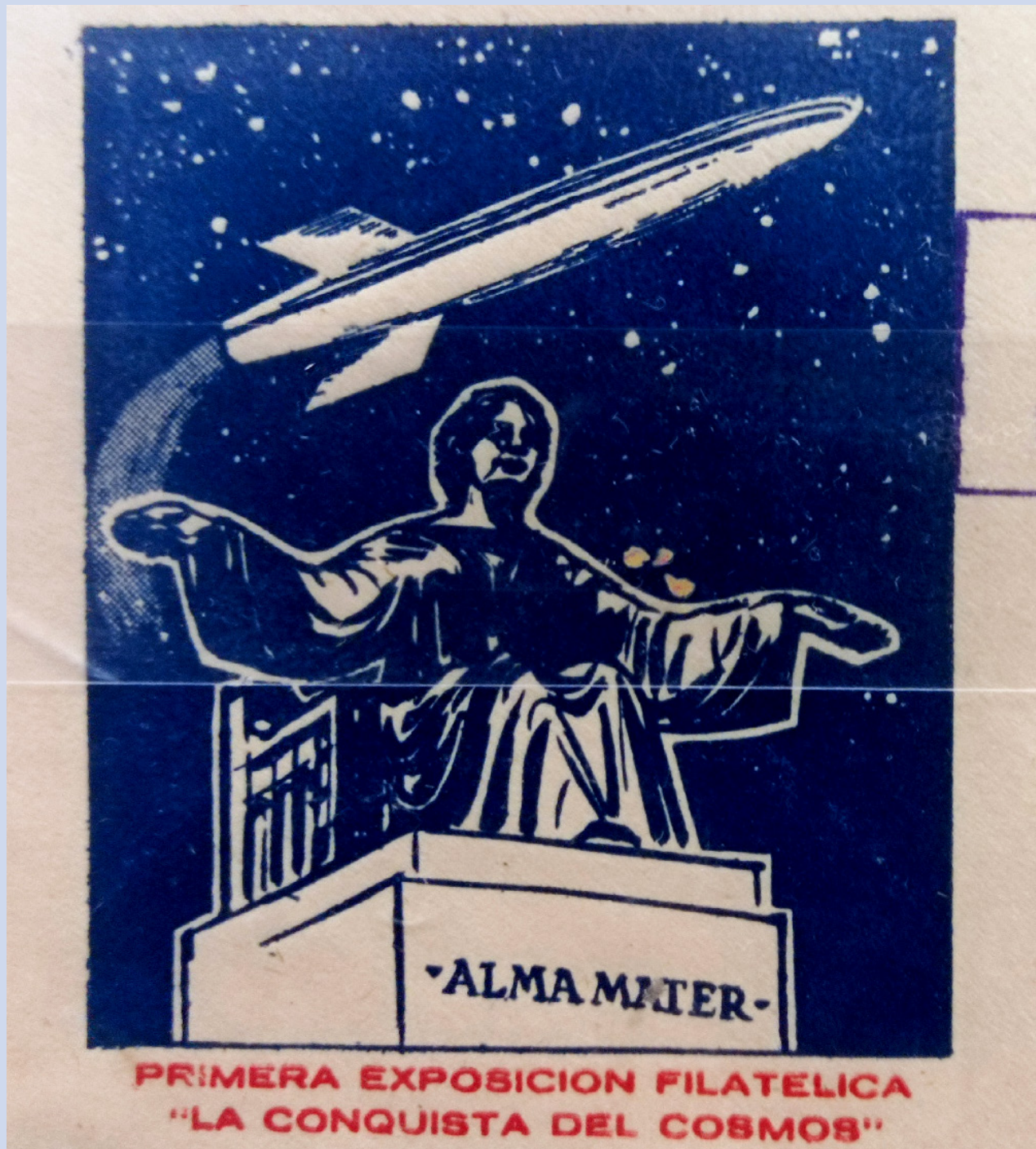


FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

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

VOL.39 No.2
DICIEMBRE, 2022



CELEBRANDO CON SELLOS

Portada: Logotipo de la primera exposición filatélica “La conquista del cosmos” dentro del Círculo Internacional Filatélico de la Amistad (Universidad de La Habana, abril de 1964).

EDITOR

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

EDICIÓN ELECTRÓNICA

M. ESPINOSA
Facultad de Física, Universidad de la Habana
mespinosa@fisica.uh.cu

A.C. IGLESIAS-JAIME
CUJAE, La Habana
iglesiasa692@gmail.com

EDITOR EJECUTIVO

E. RAMÍREZ-MIQUET
ermiquet@gmx.com

EDITORES ASOCIADOS

O. ALMORA
Universidad Pablo de Olavide, España
oalmora@upo.es

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

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

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

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

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

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@cmt.uo.edu.cu

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

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

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

Todos los artículos en formato -e:
www.revistacubanadefisica.org

COORDENADAS

- 58 **INTELIGENCIA ARTIFICIAL: ¿MUERTE, O RENACIMIENTO?**
[ARTIFICIAL INTELLIGENCE: DEATH, OR REBIRTH?]
E. Altshuler

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 60 **DATA ASSIMILATION IMPACT ON FOG/HAZE FORECAST APPLIED TO THE SHORT-RANGE RORECAST SYSTEM**
[IMPACTO DE LA ASIMILACIÓN DE DATOS SOBRE EL PRONÓSTICO DE NIEBLA/NEBLINA APLICADO AL SISTEMA DE PRONÓSTICO INMEDIATO]
P. M. GONZÁLEZ-JARDINES, M. SIERRA-LORENZO, C. M. GONZÁLEZ-RAMÍREZ
- 70 **COMPARISON OF THE NEUTRONIC BEHAVIOUR OF A PWR TYPE SMR CORE USING CERMET AND TRISO FUELS**
[COMPARACIÓN EN EL DESEMPEÑO NEUTRÓNICO DEL NÚCLEO DE UN SMR DE TIPO PWR USANDO COMBUSTIBLE CERMET Y TRISO]
J. Rosales, J- L. François, C. García
- 76 **CONCEPTUAL DESIGN UPDATE OF A SMALL MODULAR REACTOR CORE USING TRISO FUEL**
[ACTUALIZACIÓN EN EL DISEÑO CONCEPTUAL DEL NÚCLEO DE UNA REACTOR MODULAR PEQUEÑO USANDO COMBUSTIBLE TRISO]
C. García, J. Rosales, J- L. François, R. Granados, H. Martínez
- 81 **FAST DETECTION OF PROSTATE MALIGNANT TISSUE BY MULTIPULSED LASER-INDUCED BREAKDOWN SPECTROSCOPY**
[DETECCIÓN RÁPIDA DE TEJIDO MALIGNO EN LA PRÓSTATA EMPLEANDO LA TÉCNICA DE RUPTURA INDUCIDA POR LÁSER ILIBS) EN RÉGIMEN MULTIPULSO]
T. FLORES, L. PONCE
- 85 **CLAYFF FORCE FIELD VERSIS TIP3P WATER MODEL IN MOLECULAR SIMULATIONS: VALIDATION FOR MONTMORILLONITE CLAY MODEL**
[CAMPO DE FUERZAS CLAYFF VERSUS MODELO DE AGUA TIP3P EN SIMULACIONES MOLECULARES: VALIDACIÓN PARA EL MODELO DE ARCILLA MONTMORILLONITA]
A. Lam, G. Rojas-Lorenzo
- 90 **DAMAGE SPREADING AND INFORMATION DISTANCE IN CELLULAR AUTOMATA**
[PROGRAMACIÓN DE DAÑOS Y DISTANCIA INFORMACIONAL EN AUTÓMATAS CELULARES]
K. GARCÍA-MEDINA, D. ESTEVEZ-MOYA, E. ESTEVEZ-RAMS

PARA FÍSICOS Y NO FÍSICOS

- 98 **DE MEDICIONES, INCERTIDUMBRE Y REALIDAD: EL PREMIO NOBEL DE FÍSICA DE 2022**
[ON MEASUREMENTS, UNCERTAINTY AND REALITY: NOBEL PRIZE IN PHYSICS 2022]
O. DE MELO
- 109 **UNA MIRADA AL EMPLEO DE LOS LÁSERES EN UROLOGÍA**
[A LOOK AT THE USE OF LASERS IN UROLOGY]
V. FAJER, L. PONCE

MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA

- 115 **THE FIRST RESULTS OF OBSERVATIONS OF THE JOINT RUSSIAN-CUBAN OBSERVATORY**
[LOS PRIMEROS RESULTADOS DE LAS OBSERVACIONES DEL OBSERVATORIO CONJUNTO DE RUSIA Y CUBA]
S. Naroenkov, M. Nalivkin, I. Savabov, A. Alonso-Díaz, F. González, S. Derry, N. Paula-Acosta

- 121 **LA FÍSICA EN LA UNIVERSIDAD CENTRAL “MARTA ABREU” DE LAS VILLAS (PERÍODO 1952-1985)**
PHYSICS AT CENTRAL UNIVERSITY “MARTA ABREU” OF LAS VILLAS (PERIOD 1952-1985)
J. E. Hernández-Ruiz, A. Duffus-Scott

- 127 **NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS**

INTELIGENCIA ARTIFICIAL: ¿MUERTE, O RENACIMIENTO?

ARTIFICIAL INTELLIGENCE: DEATH OR REBIRTH?

E. ALTSHULER^{a†}

Grupo de Sistemas Complejos y Física Estadística. Facultad de Física, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, 10400 La Habana, Cuba; ealtshuler@fisica.uh.cu[†]

Hace algunos años, me encontraba participando en una reunión del comité editorial de una de las revistas de la *American Physical Society*. Alrededor de una larga mesa en forma de "U", se encontraban sentadas varias de las "vacas sagradas" en el mundo de la llamada Física Aplicada. . . y yo. En concreto, se estaba decidiendo qué contenidos se debían priorizar en la revista de marras. Entre ellos, se había incluido el *Machine learning* (ML)¹. Medio en broma, medio en serio, dije que me resultaba difícil comprender cómo ésa podría ser una parte de la Física Aplicada. Recuerdo nítidamente cómo uno de los respetables científicos que estaba sentado enfrente se tiró súbitamente hacia atrás en su asiento con una expresión de asombro, como si hubiera experimentado un shock eléctrico. Fue una experiencia iluminadora: hoy día es común encontrar artículos que explotan el famoso *Machine learning* en numerosos campos de la ciencia, ciertamente incluyendo la Física Aplicada [1].

Pero por aquella época, mi concepto de hacer Física estaba indisolublemente vinculado a entender. Entender, en primera aproximación, al modo "convencional": proponer un modelo simplificado de la realidad, escribir –por ejemplo– un sistema de ecuaciones diferenciales que contuvieran los elementos del modelo, resolverlas, y reproducir con ellas los resultados experimentales –eso sí; usando la menor cantidad de parámetros "libres" posible [2]. Creo que las físicas y físicos seguimos considerando que este es el paradigma de la elegancia del pensamiento físico –de la *inteligencia natural*, podríamos decir.

Pero en honor a la verdad, ya por aquella época mi concepto de "entender" estaba sufriendo una metamorfosis. Pongamos el caso de las avalanchas que ocurren al crecer una pila de arena –o una pila de vórtices superconductores– cuya distribución de tamaños sigue una ley de potencias. Podemos implementar una especie de "juego computacional" conocido como *autómata celular*, que intenta imitar al sistema real. En el autómata, se agregan granos sobre un suelo discretizado en forma de cuadrícula, y se imponen ciertas leyes para el comportamiento de los mismos al llegar a él (una de estas leyes, en versión muy simplificada, dicta que si en un escaque de la cuadrícula hay demasiados granos, éstos se reparten equitativamente entre los escaques vecinos) [3]. En esta nueva forma de pensar la Física, las ecuaciones (muy difíciles de resolver para una pila en más de una dimensión) han sido sustituidas por "reglas computacionales" dictadas, en buena medida, por el sentido común. Reglas que, al ser capaces de

reproducir el resultado experimental, nos dan la sensación de "entender".

Pero hace algunos años que la llamada *Inteligencia Artificial* (IA) está subiéndonos –¿o bajándonos?– la parada: hoy podemos resolver muchos problemas no sólo prácticos, sino científicos, sin la necesidad de la intervención humana –y, por lo visto, sin la necesidad de entender. El crecimiento de la IA es arrollador, y obviamente no disminuirá su paso. En el ámbito nacional, creo que la Historia nos impulsa a prestarle más atención a la enseñanza de la IA *en pregrado* dentro de las carreras de Física existentes en Cuba, expandiendo los esfuerzos que ya realiza MATCOM en la Universidad de La Habana, y algunas carreras de la CUJAE y de la UCLV. Es, de hecho, una oportunidad evidente de tender un nuevo puente entre disciplinas.

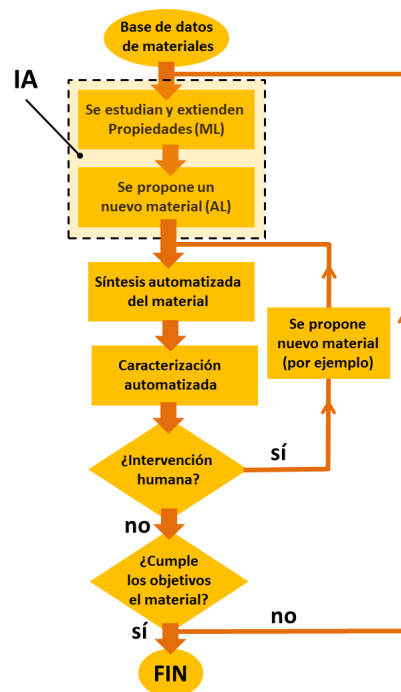


Figura 1. La inteligencia artificial "haciendo ciencia de materiales". Diagrama de bloques que representa una versión personal del sistema CAMEO.

La Inteligencia artificial no es cosa nueva. Muy laxamente, se trata de la parte de las ciencias de la computación que intenta lograr que las computadoras actúen "inteligentemente" mediante una gran variedad de algoritmos, donde hoy sobresalen las redes neurales. La parte de la IA que

¹Que a veces se traduce al español como "aprendizaje automático"... pero me parece un término tan burocratizante, que lo obviaré en el resto del artículo.

involucra algoritmos para el aprendizaje directo a partir de ejemplos y datos (muchas veces en cantidades masivas –*Big Data*) se conoce como *Machine Learning*. Y dentro de ésta última rama, tenemos el *Active Learning* (AL) (Aprendizaje Activo), que se dedica al diseño óptimo de experimentos [4]. Recuerdo como, fines de los 1980's y principios de los 1990's, el descubrimiento de la Superconductividad de Alta Temperatura Crítica desencadenó una competencia furibunda entre numerosos laboratorios del mundo que, sin entender a derechas los mecanismos físicos involucrados, probaban cientos de composiciones combinando diversos elementos químicos para encontrar el "Santo Grial": un material superconductor a temperatura ambiente². Este estilo de trabajo no es exclusivo, por cierto, del mundo de los superconductores, y obviamente representa un sustancial gasto de recursos y tiempo. Justamente, éste es uno de los escenarios donde la inteligencia artificial ha mostrado impresionantes credenciales.

Utilizando herramientas de inteligencia artificial, ha surgido el CAMEO –Closed-loop, Autonomous system for Materials Exploration and Optimization (Sistema Autónomo a Lazo cerrado para la Exploración y Optimización de Materiales) [4] que estoy representando, en versión libre, en la Fig. 1. Supongamos que queremos "inventar" un nuevo material con ciertas propiedades físicas. Un programa de *Machine Learning* examina una amplia base de datos sobre materiales relacionados –pero no tan "buenos" como el que deseamos. Luego, utilizando *Active Learning*, el sistema propone un nuevo material que pudiera cumplir el objetivo propuesto (pudiera ser el resultado de cambiar la estequiometría de un material previamente existente en la base de datos). De forma robotizada, se sintetiza el material en cuestión en el laboratorio real y se caracteriza –determinando, entre otras, la propiedad "clave" que se quiere optimizar. Aquí, existe la opción de intervención humana: un experto, por ejemplo, pudiera proponer una composición algo diferente, en vez de la propuesta por el sistema. Pero si el ser humano deja a CAMEO hacer su trabajo, el sistema chequea si el material resultante ha cumplido las expectativas. En caso de que se haya logrado, da por terminado el proceso. Si no, la IA realiza un nuevo estudio de la base de datos, propone un nuevo material... y así, hasta obtener la muestra deseada.

En un trabajo reciente, CAMEO exploró autónomamente el sistema ternario Ge-Sb-Te con el objeto de identificar un material óptimo para fabricar una memoria de cambio de fase (PCM), donde la información pueda ser accedida en el rango de los nanosegundos, o incluso más rápido. En el pasado, se ha usado el compuesto $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ en tales memorias. Sin intervención humana, CAMEO logró el objetivo para una composición promedio $\text{Ge}_4\text{Sb}_6\text{Te}_7$. El proceso tomó 19 iteraciones del proceso representado de forma simplificada en

la Fig. 1, con una duración total de tan sólo 10 horas [4]. Para que no quedaran dudas, los autores de CAMEO fabricaron un interruptor fotónico con el material resultante, y demostraron que es mucho mejor que los previamente diseñados por nuestra modesta inteligencia humana.

¿Dónde nos deja esto a nosotros, los científicos? ¿Quizás nos convertiremos en humildes técnicos que repararemos los difractómetros que usa CAMEO en espera de que los robots guiados por IA aprendan a repararlos más eficientemente? ¿Nos convertiremos todos en programadores de Inteligencia Artificial, mientras ella aprende a auto-programarse? Aún peor: Ante la perspectiva de obtener cualquier solución "pulsando un botón", ¿será desechada por la sociedad humana la necesidad de *entender*?

Creo que no. El ser humano se resiste estoicamente a no entender, incluso desde la época previa a la Inteligencia Artificial. Durante muchos años, por ejemplo, la Física Cuántica utilizó el paradigma de "¡Cállate y calcula!" ("Shut up and calculate!") [5] basada en la enorme efectividad de una teoría que, sin embargo, era tan incompatible con nuestra intuición. Pero un grupo de físicos –inicialmente bastante marginados– opinaba que *había que entender*. Y, aparentemente, lo lograron. Su esfuerzo acaba de ser reconocido con el Nobel de Física de este año³.

Creo que, en un mundo dominado por la Inteligencia Artificial, la ciencia experimentará más un renacer que una muerte. Opino que la ciencia "exploratoria", repetitiva y aburrida quedará en manos de la Inteligencia Artificial, permitiendo que nos ocupemos de las tareas verdaderamente creativas –en especial, aquellas asociadas a las llamadas "ciencias básicas". Tareas que ahora mismo sería imposible enumerar. Porque son aquellas que sólo se revelan cuando nos cae una manzana en la cabeza.

REFERENCES

- [1] A. Kyrtos, J. Glennon, A. Glasmann, M. R. O'Masta, B.-M. Nguyen, E. Bellotti, *Phys. Rev. Appl.* **15**, 064008 (2021).
- [2] 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).
- [3] K. E. Bassler, M. Paczuski, E. Altshuler, *Phys. Rev. B* **64**, 224517 (2001).
- [4] A. G. Kusne, H. Yu, Ch. Wu, H. Zhang, J. Hattrick-Simpers, D. DeCost, S. Sarker, C. Oses, C. Toher, S. Curtarolo, A. V. Davydov, R. Agarwal, L. A. Bendersky, Mo Li, A. Mehta, I. Takeuchi. *Nat. Commun.* **11**, 5966 (2020).
- [5] D. Mermin, *Physics Today*, **42**, 9 (1989).

²Vale aclarar que (a) seguimos sin entender los mecanismos físicos involucrados y (b) seguimos sin haber obtenido un superconductor a temperatura ambiente –fuera del ambiente del espacio exterior, naturalmente.

³Ver el artículo correspondiente al Premio Nobel de Física en el presente número.

DATA ASSIMILATION IMPACT ON FOG / HAZE FORECAST APPLIED TO THE SHORT-RANGE FORECAST SYSTEM

IMPACTO DE LA ASIMILACIÓN DE DATOS SOBRE EL PRONÓSTICO DE NIEBLA/NEBLINA APLICADO AL SISTEMA DE PRONÓSTICO INMEDIATO

P. M. GONZÁLEZ JARDINES^{a†}, M. SIERRA LORENZO^a AND C. M. GONZÁLEZ RAMÍREZ^b

a) Centro de Física de la Atmósfera, Instituto de Meteorología, La Habana, Cuba; pedro.met90@gmail.cu[†], maibys.lorenzo@insmet.cu

b) Centro Meteorológico Provincial Habana-Artemisa-Mayabeque, Instituto de Meteorología, La Habana, Cuba; carlosm.ramirez@insmet.cu

[†] corresponding author

Recibido 25/1/2022; Aceptado 25/8/2022

During the early morning of January 4th, 2019, a dense fog episode occurred over the western region of Cuba, which affected areas of socioeconomic importance. This research studies three data assimilation methods; 3DVAR and two hybrid variants, 3DEnVAR and ETKF-3DVAR, applied to the 00:00 UTC initialization of the WRF model. The way of obtaining the first guess and the flow-dependent perturbations used in the hybrid schemes is modified. Data in prepbufr and radiances formats are assimilated, analyzing the impact of each type of data on assimilation and forecasting. The results obtained indicate that, although all the assimilation techniques studied lead to improved forecasting in the short and very short term, the combination of the 3DVAR method and the data content in prepbufr format is the one that offers the best results.

Durante la madrugada del 4 de enero de 2019 se presentó un episodio de niebla densa sobre la región occidental de Cuba, que afectó zonas de importancia socioeconómica. En esta investigación se estudian tres métodos de asimilación de datos; 3DVAR y dos variantes híbridas, 3DEnVAR y ETKF-3DVAR, aplicados a la inicialización a las 00:00 UTC del modelo WRF. Se modifica la forma de obtener la primera aproximación y las perturbaciones dependientes del flujo utilizadas en los esquemas híbridos. Se asimilan datos en formato prepbufr y radiancias analizando el impacto de cada tipo de datos en la asimilación y pronóstico. Los resultados obtenidos indican que, aunque todas las técnicas de asimilación estudiadas conducen a mejorar el pronóstico a corto y muy corto plazo, la combinación entre el método 3DVAR y el contenido de datos en formato prepbufr es la que mejores resultados ofrece.

PACS: Atmospheric optics (óptica atmosférica), 42.68.Ge; Weather analysis and prediction (análisis y predicción del tiempo), 92.60.Wc; Meteorology (meteorología), 92.60.-e.

I. INTRODUCTION

A large number of investigations have been oriented to the forecast of fog events. A group of researchers has based their work on the implementation of empirical algorithms that allow estimating horizontal visibility [1–6]. The algorithms proposed by these authors based the estimation of the horizontal visibility in the concentration of the different species of hydrometeors and the relative humidity. These algorithms are obtained in most cases as a result of regression analysis, for which they contain empirical coefficients based on measurements made in the United States fundamentally. This can have as a consequence that they do not adequately represent the behavior of the variables involved in their calculation in a certain region.

Other researches have advanced in the sensitivity study with different parameterizations in order to predict favorable conditions for the appearance of fog events, where the use of the WRF (Weather Research and Forecasting) mesoscale model has prevailed [7]. Such works study the impact of the parameterizations of microphysics, planetary boundary layer and radiation in the genesis, development and dissipation of fog events, [8–12]. A detail that appears in almost all of these studies is the influence of the model's spin-up process, that prevents satisfactory results, at least during the first 12

forecasting hours. This creates difficulties for to obtain an efficient short-term fog forecast.

Nowadays in Cuba, a numerical weather forecasting project based on the WRF is in operation, with the fundamental objective of short and very short-term forecasts [12], called Short-range Forecast System (SisPI, acronyms in Spanish). In order to mitigate the effect of spin up the variant proposed in SisPI is the incorporation of data assimilation techniques to the model [12]. There are diverse assimilation methods implemented in software packages like GSI (Grid-point Statistical Interpolation) and WRFDA (WRF-Data Assimilation) that have been widely used, and several ones have been tested for forecasting fog events with satisfactory results.

For instance, [13] applied the 3DVAR (Three-Dimensional Variational) method with satellite data to predict a fog event over the Yellow Sea, finding that better humidity and temperature profiles are obtained on the marine boundary layer. Other authors such as [14] compared the results obtained by the 3DVAR and EnKF (Ensemble Kalman Filter) methods, in two study cases on the Yellow Sea, concluding that the EnKF offers better results than those obtained with 3DVAR. Similar results were achieved in [15], with the application of the EnKF to a one-dimensional model oriented to the fog forecast, obtaining a significant improvement in the

initial conditions of the model, thanks to more realistic profiles of temperature and specific humidity.

These studies introducing a series of questions focused on the application of data assimilation to fog prediction. Those points are around which data is most appropriate to assimilate or which method is the most optimal, taking into account not only the results, but also the computational cost for its application for operational purposes.

This research evaluates the impact of several assimilation methods in the forecast of a fog event that occurred on January 4th, 2019 in a sector of the western region of Cuba. It also analyzed the impact of use of prepbufr and radiance data, individually and combined, on the assimilation to obtain the most optimal configuration (method and data). The evaluation is carried out in the initialization corresponding to 00:00 UTC (United Time Coordinated) in order to assess the assimilation impact on the short and very short-term numerical forecast.

II. MATERIALS AND METHODS

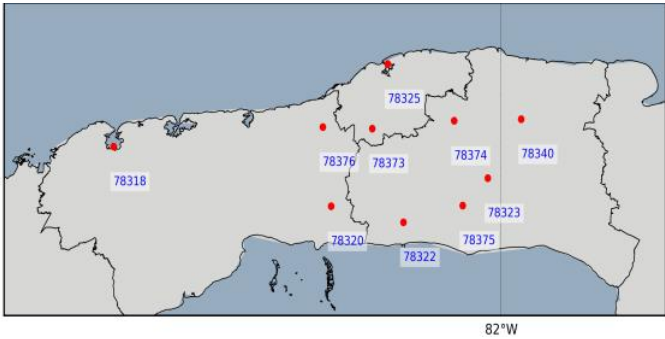


Figure 1. Study area. Geographical location of the meteorological stations.

The study area is framed in the provinces of Artemisa, Havana and Mayabeque which are located in the western region of the country and have ten meteorological stations (Fig. 1). In this region, radiation fog/haze events predominate, and they are related to the proximity of frontal systems in the Gulf of Mexico, where the subtropical anticyclone imposes a weak flow from the second quadrant. They also tend to appear in situations of marked anticyclone influence, where the presence of weak pressure gradients is combined with strong nighttime radiation [16]. They are more common and tend to be more intense in the dry period of the year (November-April). The time of 12:00 UTC is the one with the highest frequency of reports of both phenomena [17].

II.1. Model Stup

To develop the experiments, the WRF model was used with the dynamic core ARW (Advanced Research WRF) in its 3.8.1 version; which constitutes the fundamental core of SisPI [12]. It has two-way nested domains of 27 (d01: 140 x 78) and 9 km (kilometers) (d02: 199 x 112) of spatial resolution and a domain of 3 km (d03: 421 x 184) of one-way nested solver using the ndown tool (Fig. 2). This design is the same as the operational

configuration of SisPI that currently runs in INSMET (Institute of Meteorology, acronyms in Spanish).

The temporal resolution of 27 and 9 km domains is every three hours, while the 3 km domain provides forecasts every hour. The model was initialized from forecast data of the GFS (Global Forecast System) with 0.5° horizontal resolution.

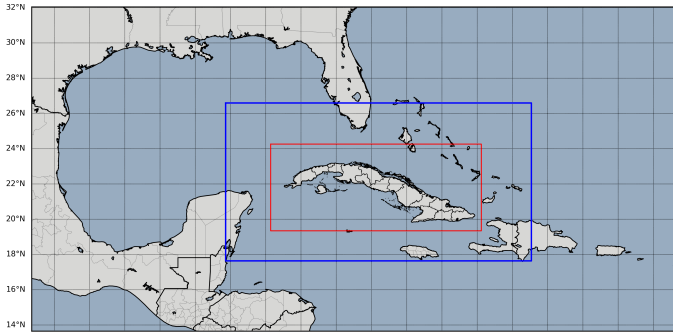


Figure 2. Domains used in SisPI; (external) 27 km, (blue square) 9 Study area. Geographical location of the meteorological stations.

The physical configuration of the WRF used in SisPI is presented in Table 1:

Table 1. Some physical parametrization schemes used by SisPI for the three domains [12]

Parametrizations	Domanin 27 km Domain 9 km	Domain 3 km
Microphysics	WDM5 (WRF- single moment 5)	Morrison 2-moment
Cumulus	GF (Grekk-freitas)	not used
Boundary layer	MYNN 2.5 (Mellor-Yamada Nakanishi and Niino 2.5)	
Short wave radiation	Dudhia	Goddard
Long wave radiation	RRTM (Rapid Radiative Transfer Model)	
Surface border	Monin-Obukhov	
Surface	Unified Noha land-surface model	
Vertical levels	28	

II.2. Desing of assimilation experimets

Assimilation was applied only at the highest resolution domain. Two fundamental factors lead to this choice: the SisPI execution philosophy that implies that, the highest resolution domain have initial and boundary conditions adjusted to it and includes the whole island and adjacent seas (Fig. 2), at second place data assimilation only can be applied to one domain individually. The main disadvantage lies in the fact that, being a relatively small spatial coverage nest, the volume of the available data to assimilate can highly variable, especially with the ingestion of radiances, because its come from polar-orbiting satellites.

This differs from other studies that perform assimilation in the parent domain as is the case of the study examples on the Yellow Sea [13,14]. However, in other researches of mesoscale

phenomena, such as heavy rain, where the WRF execution philosophy is similar to SisPI, the assimilation is also carried out in the domain with the highest resolution [18, 19].

The methods 3DVAR [20] and two hybrid variants are used. The 3DVAR method can be summarized as the iterative solution to find the state x that minimizes the cost function (1). This solution represents the a posteriori maximum likelihood (minimum variance) estimate of the true state of the atmosphere given the two sources of a priori data: the background field and the observations.

$$J(x) = \frac{1}{2}(x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b) + \frac{1}{2}(y - H(x))^T R^{-1}(y - H(x)) \quad (1)$$

where $J(x)$ is the cost function, x is the analysis field, x_b the background field, B the covariance matrix, H is the observational operator included into WRFDA and R is the observational covariance error.

The hybrid method 3DEnVAR (Three Dimensional Ensemble-Variational [21–23], requires a previous ensemble whose average is used as a first approximation. This ensemble is also used to represent the flow-dependent background errors that are combined with the static covariance error (2).

$$J(x_1; \alpha) = B_s \frac{1}{2}(x_1 - x_b)^T B^{-1}(x_1 - x_b) + B_e \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (\alpha_i^T C^{-1} \alpha_i) + \frac{1}{2} [y - H(x_1 + x_e)]^T R^{-1} [y - H(x_1 + x_e)] \quad (2)$$

where α_i is the ensemble weight and C the correlation matrix for the localization of ensemble perturbations.

The other hybrid method used responds to the combination of the ETKF (Ensemble Transform Kalman Filter) and 3DVAR [24], known as ETKF-3DVAR, which will simply be referred as ETKF throughout the paper. This method provides a framework for assimilating observations and also for estimating the effect of observations on forecast error covariance. It differs from other ensemble Kalman filters in that it uses ensemble transformation and a normalization to rapidly obtain the prediction error covariance matrix associated with a particular spread of observation sources.

This last scheme shows the disadvantage that, being based in the EnKF, the localization is carried out in the space of observation, unlike purely variational or 3DEnVAR schemes that use the model space, allowing non-local observations such as radiances to be assimilated. This limits the assimilable data for the application of ETKF to the prepbufr format in this research.

For the methods 3DEnVAR and ETKF the construction of the first guess was changed. In a first variant, a 10-member multiphysics ensemble is used, modifying the microphysics and boundary layer parameterizations that have shown the best performance in the study area, according to sensitivity studies developed by [12, 25]. For this case, the ensemble members building is more computationally

expensive, because required 3 km outputs for to be used like first guess.

The second variant uses a 6-member ensemble using the previous SisPI outputs that contain the initialization time, with a configuration described in the (Table 1). The number of members in the second case responds to the fact that currently the SisPI is initialized every 6 hours (four cycles per day), with a 36 hours forecast extension, which allows up to 6 previous initializations. This desing is less expensive than previous, because it use existing model outputs and is not necessary generate them like desing above.

Through the different assimilation techniques proposed, the data assimilation employed prepbufr and radiance formats, individually and jointly, in order to analyze the impact of the type of data that is assimilated on the fog/haze forecast (Fig. 3). The data contained in the prepbufr files include information in FM12, METAR codes, ship data, buoys and sounding. Regarding the assimilation of radiances, data in the microwave channel bufr format were used: AMSU-A (NOAA-15/16/18/19), MHS (NOAA-18/19), SSMIS (DMSP-16) and ATMS (Suomi-NPP), in all cases extracted from the site <https://rda.ucar.edu/datasets>.

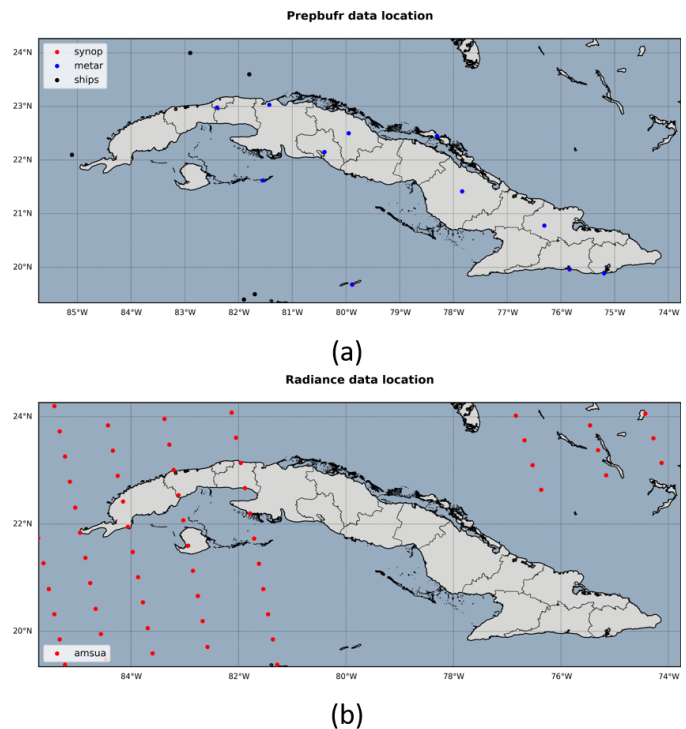


Figure 3. Data types assimilated with proposed methods; (a) prepbufr format, (b) radiances in bufr format.

For the design of the experiments, the recommendations proposed by [26] were followed and which are contained in the presentation about good practices with the WRFDA, available on the site <https://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/wrfda>. They include the use of three iterative outliers loops with the 3DVAR method and only one with the hybrid schemes because the impact of the cycles is stronger in 3DVAR [26]. In the hybrid methods cases, was established empirically a

weight of 50 % between the generic covariance matrix and the flow-dependent background error obtained from the members of the ensemble.

Due to the fact that the process of generating domain-dependent matrices to obtain the background error is usually computationally expensive, it was decided to use the generic matrix provided by the WRFDA module in these experiments. This matrix can be used as background error for any regional application according to the WRF user manual [12].

Table 2, below, contains the selected nomenclature for the experiments, the types of data that are assimilated and the parameters that vary in each case.

Table 2. Data assimilation experiments.

Assimilation method	Assimilated data	Description
3DVAR.P	prepbufr	3 outer loops
3DVAR.R	radiance	
3DVAR.PR	prepbufr + radiance	
3DEnVAR.P	prepbufr	10 members multiphysics, 1 outer loops
3DEnVAR.R	radiance	
3DEnVAR.PR	prepbufr + radiance	
3DEn2VAR.P	prepbufr	6 members configuration Table 1, 1 outer loops
3DEn2VAR.R	radiance	
3DEn2VAR.PR	prepbufr + radiance	
ETKF	prepbufr	10 members multiphysics, 1 outer loops
ETKF2	prepbufr	6 members configuration Table 1, 1 outer loops

II.3. Algorithms used to calculate horizontal visibility

With the purpose of generating fog/hazes events forecasts in the study area, an algorithm is used to estimate the horizontal visibility. This algorithm name's is Cvis [5,9] (3), which choose the minimum value among the algorithms proposed by [2]; (3) and [3]; (4).

$$SW_{99} = \frac{-\ln(0.02)}{\beta} \quad (3)$$

where

$$\beta = \beta_{cw} + \beta_{rw} + \beta_{ci} + \beta_{sn} \quad (3.1)$$

$$\beta_{cw} = 144.7(C_{cw})^{0.88} \quad (3.2)$$

$$\beta_{rw} = 1.1(C_{rw})^{0.75} \quad (3.3)$$

$$\beta_{ci} = 163.9(C_{ci})^{1.0} \quad (3.4)$$

$$\beta_{sn} = 10.4(C_{sn})^{0.78} \quad (3.5)$$

β is the light extinction coefficient (km⁻¹) and C the concentration of four different species of hydrometeors (water liquid content-cw, rain water-rw, ice-ci and snow-sn); obtained from the corresponding mixing ratios calculated by the model [9].

$$FSL = 1.609 \cdot 6000 \cdot \frac{T - T_d}{rh^{1.75}} \quad (4)$$

This algorithm proposes that visibility can be obtained from a relationship between dew point depression (numerator) and relative humidity (rh). The coefficient 1.609 is used to convert from miles to kilometers [5,9].

Therefore

$$Cvis = \min(SW_{99}; FSL) \quad (5)$$

II.4. Forecast verification

To verify the results of the forecast, a cell-point verification strategy was used in the study area, always on the domain with the highest resolution. The analysis is focused in the variables wind speed, dew point depression and relative humidity, and their real data are obtained from the measurements recorded in the meteorological stations from study area (figure 1). This allowed obtaining the values of the mean absolute errors (6) and root mean square error (7) in each of the experiments (MAE and RMSE respectively).

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O - P) \quad (6)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^n (O - P)^2} \quad (7)$$

Where O represents the observation, P the forecast and N represents the total data to be compared.

Since assimilation allows correcting the initial background condition (first guess) by using observations, a good technique to measure the impact of assimilation is incremental analysis (Fig. 4). This is obtained by calculating the differences between the first guess and the analysis field a posteriori. This study performs an incremental vertical analysis to evaluate the impact of the different assimilation designs on the background field and how assimilation improves (or not) the model initial condition.

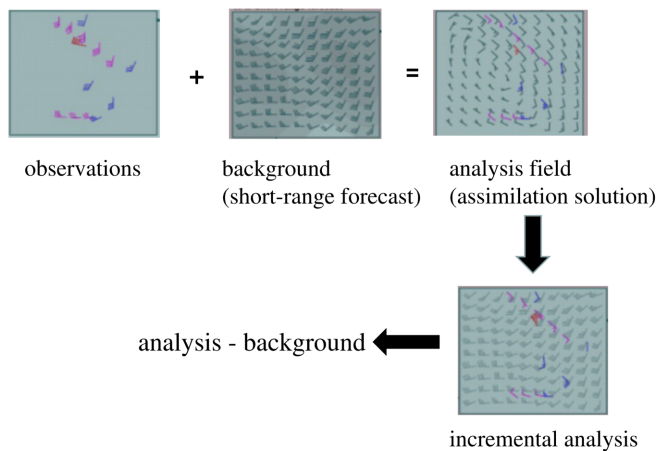


Figure 4. Representative diagram of incremental analysis (modified from COMET www.meted.ucar.edu).

Taking into account that horizontal visibility measurements have a high subjective component since they depend on the observer's skill, a binary analysis of the phenomenon is used as an evaluation methodology, where its occurrence/non-occurrence is verified comparing the model's solutions with the present weather code value registered at weather stations (FM-12 code for weathers stations). For the calculation of the dichotomous statisticians a contingency table is used (Table 3).

The contingency analysis was carried out individually for fog and hazes reports which allow obtaining an approximate idea of the degree of overestimation or underestimation of the intensity of the phenomenon. Due to the need of homogenizing the forecasts for their comparison with the present weather code, the definitions of fog and haze dictated by the World Meteorological Organization [27] are considered.

Taking into account those facts, in the case of fog events, a hit is considered when the predictor algorithm (Cvis) forecasted values less than or equal to 1 km and the present weather code registered values between 40 and 49 (fog); failures when the algorithm forecasted values greater than 1 km and in the present weather code values related to fog were recorded and false alarms when the forecast revealed values equal to or less than 1 km, but in the present weather code no values relative to fog appeared. Regarding the haze, the philosophy described above for them was followed, considering the predicted values, greater than 1 km and less than or equal to 5 km according to present weather records of 10.

Table 3. Contingency table

Forecasted	Observed	
	Yes	No
Yes	a (hit)	b (false alarms)
No	c (miss)	d (correct rejection)

Starting from the results of the contingency analysis, three statistics were calculated that allow the evaluation of the

forecasts (8,9,10).

$$H = \frac{a}{a + c} \quad (8)$$

$$F = \frac{b}{b + d} \quad (9)$$

$$CSI = \frac{a}{a + b + c} \quad (10)$$

III. RESULTS

III.1. Synoptic situation. Characteristics of the events and its representation with the WRF model

Between the night of the 3rd and the early morning of January 4th, 2019, a weak cold front was over the eastern portion of the Gulf of Mexico. This synoptic pattern generates weak from the second quadrant winds over the study area and a strong radiative cooling favored by the stability conditions imposed by the subtropical anticyclone periphery's influence. This causes the heat accumulated on the surface during the day rises towards the lower layers, limiting its rise due to the subsidence generated by the anticyclone, which leads to a sufficient surface cooling to allow moisture to rise and condense causing the appearance of a fog/haze process by irradiation (Fig. 5a).

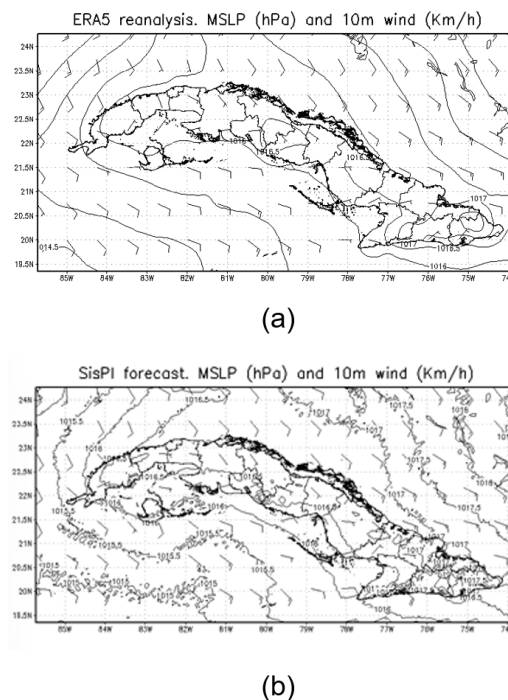


Figure 5. (a) Surface wind and pressure fields obtained from the ERA5 reanalysis (adapted to the highest spatial resolution domain latitude-longitude dimensions) (b) SisPI's forecast. January 4th, 12:00 UTC.

In situations like this, the appearance of an inversion of the temperature is common in the lower layers where the heat

transferred by the surface is concentrated. The weakness of the winds at the low levels, generated by this synoptic configuration, diminishes the mixing processes by turbulence allowing the super saturation below the base of the inversion.

SisPI adequately forecast the synoptic flow representing the position and intensity of the synoptic scale systems that day. However, a more westward expansion of the anticyclonic ridge can be seen, coinciding with a slight strengthening of surface wind speeds, mainly toward the west of the ridge, presumably as a result of a slight strengthening of baric gradients in that ridge side at the model solutions (Fig. 5b).

Consequently to these characteristics, the phenomenon begun at the night of the 4th by 00:00 UTC (Fig. 6) with hazes reports in the 78320 station, located at southeast of the study area (Fig. 1). The haze event continued strengthening and at 03:00 UTC, 4 stations already reported this phenomenon. By 06:00 UTC, a total of 6 weather stations were reporting fog, while 78340, 78373 and 78376 ones were reporting fog starting in the preceding hour, with estimated visibilities around 500 meters.

As can be appreciated, the 09:00 UTC marked the moment of greatest intensity of the phenomenon according to the present weather reports. A total of 6 stations reported visibilities less than or equal to 300 meters, being the inner region of the study area the most affected. At 12:00 UTC a gradual weakening of the phenomenon began to be experienced, 6 stations reported haze, while the others, all in the inward portion, continued reporting fog with visibilities estimated between 200 and 700 meters. By the 15:00 UTC observation, the phenomenon was completely dissipated.

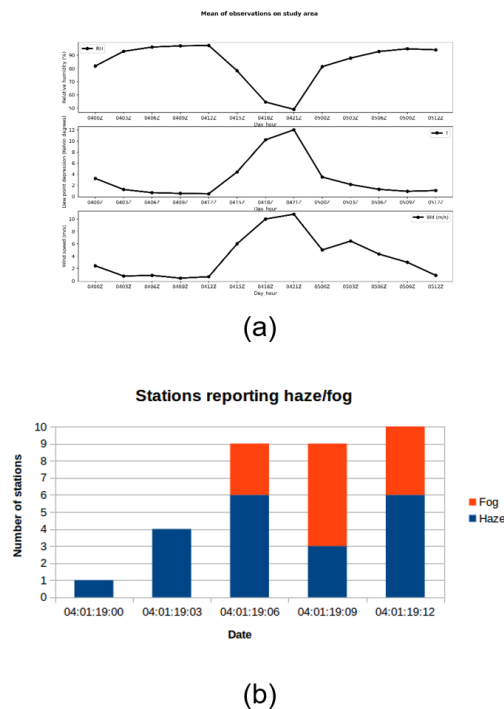


Figure 6. Number of stations in the study area reporting fog or haze (b) and average behavior of relative humidity, wind speed and dew point depression (a) in the period of time between 00:00 and 12:00 UTC on January 4th, 2019 in the study area.

Observations indicate that the phenomenon was weaker

towards the north coast where was reported haze only and stronger towards the inner region. This behavior has been described by several Cuban author's who state that these phenomena tend to be weaker towards the coasts, apparently due to the modulating effect of the sea that reduces the radiative cooling rate [16,17,27].

III.2. Forecast evaluation without data assimilation

The radiative cooling is one of the main physical mechanisms associated with radiation fogs [10,16], as it diminishes the capacity of a given air mass to retain water vapor. This is essential because in tropical regions, even a relatively small cooling could lead to the genesis of fog/haze processes. In the no-assimilation experiment the model predicts an average radiative cooling rate slower than the observations (0.88°K/h [Kelvin degrees per hour] vs 1.66°K/h), consequently the mean absolute errors of temperature over the study area were between -2.5 and -3.5°K.

Warmer environments imply a higher vapor retaining capacity from the surrounding air mass; therefore this solution may correlate with an underestimation of relative humidity. The results obtained in the evaluation of the predictions of this variable corroborate the previous sentence.

In the simulation there was an underestimation of its values with mean errors close to 5 % (Fig. 7). These results coincide with several authors who obtain that the WRF tends to underestimate the relative humidity values, placing them sometimes below the threshold required for fog formation [10,28].

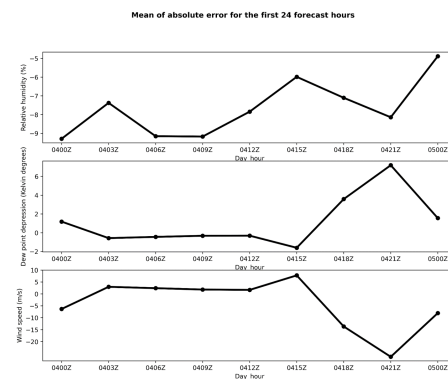


Figure 7. Mean absolute error over the study area for the relative humidity, dew point depression and wind speed from the moment of initialization until 12:00 UTC on January 4th, 2019.

However, the radiative cooling and increased humidity may not be sufficient elements to generate and sustain a radiation fog/haze event. For this, it is necessary that low wind speeds reduced the mixing processes due to turbulence allowing in this way, the development of the event [10]. The wind speeds increasing not only contributes to the increase of the turbulent mixing, even to the erosion of the thermal inversion too, that tends to be weak in tropical regions if compared to mid-latitudes making it's, consequently is more susceptible to changes in wind speed.

In the experiment the wind speed overestimation was above -2.5 m/s as average, exceeding -3 m/s between 06:00 and 09:00 UTC when the winds were in calm at almost all weather stations on the study area. (Fig. 7).

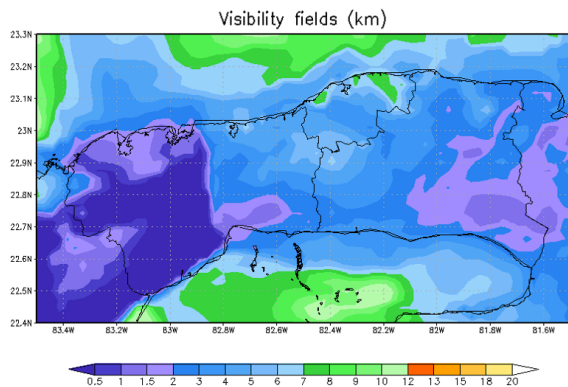


Figure 8. Forecast obtained by the Cvis algorithm for the study area corresponding to 09:00 UTC on January 4th, 2019

This scenario is consistent with the Cvis's results (Fig. 8). The without assimilation model's solution predicts haze events from moderate to weak over the study area, underestimating the fog's intensity that occurred in the early morning on January 4th, 2019, as it was not able to forecast fog events that occurred in the interior and southern regions even at times of greatest intensity.

III.3. Assimilation impact

The assimilation schemes fail to substantially modify the errors in the representation of the synoptic flow (Fig. 9). They continue to represent the ridge extended to westward, which is evidenced at the wind direction from second quadrant. However in some cases like 3DVAR_P (Fig. 9a), 3DVAR_PR (omitted figure), 3DEn2VAR_R (Fig. 9b) and ETKF (omitted figure) it is possible to appreciate a relative weakness in the flow as a result of weaker baric gradients, that leads to more realistic solutions and more a successful forecast.

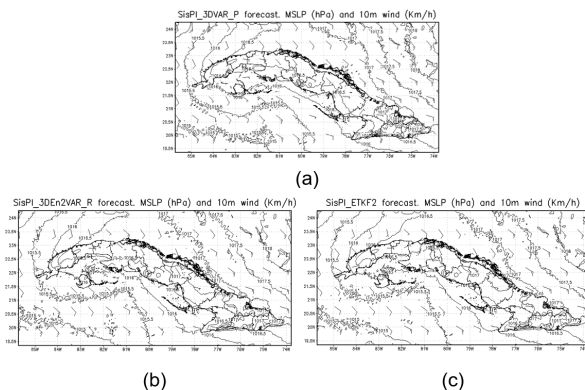


Figure 9. Surface wind and pressure fields forecasted (a) 3DVAR_P (b) 3DEn2VAR_R and (c) ETKF2. January 4th, 12:00 UTC.

In the opposite direction, the others schemes contributes to a somewhat stronger wind regime, occasionally higher than the SisPI solutions, which indicates that the application of the assimilation methods in these cases, as they have been designed, they are not effective.

III.4. Incremental analysis

At the incremental analysis it is observed that the 3DVAR_P experiment showed an increase in humidity values at troposphere low levels with respect to without assimilation solution and with a tendency to rapidly decrease generating a drier environment starting at surface of 925 hPa, confining the moisture layer below this level although the increments does not exceed 1%. That means that this experiment build a initial condition slightly more realistic forecasting an air mass with higher water vapor content. The other combinations that include radiance data generated analysis fields with drier environments at all levels, compared to obtained without data assimilation, in a threshold between -0.1 and -1.5 % (Fig. 10a). This solutions are less closer to observations.

The hybrid methods that use the multiphysics ensemble generated an more moist initial condition with increases between 3 and 12 %, presenting a main maximum contribution between 750 and 850 hPa as well as a second maximum in the levels closer to the surface. Those results suggest an increase in the vapor content in the superficial layers and the region corresponding to the boundary layer, elements that are needed for the formation of fogs (Fig. 10b).

On the other hand, the methods that start from the ensemble generated from SisPI previous runs showed an increase in humidity with a maximum around 10 % at the 950 hPa level, showing also a fast decrease in the layer between 900 and 750 hPa, generating an increasing trend above the surface of 700 hPa.

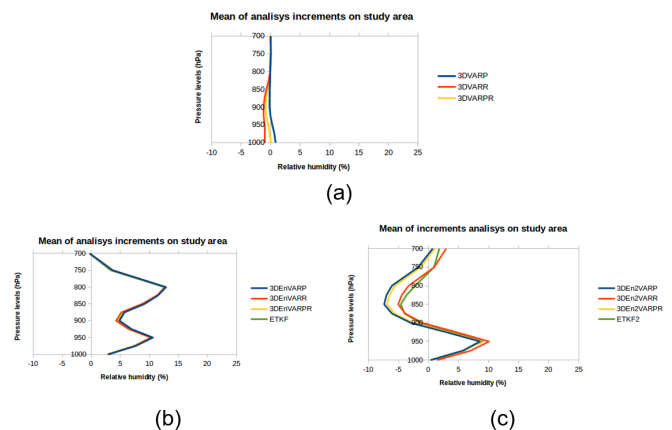


Figure 10. Incremental analysis of relative humidity for the different assimilation schemes applied. (a) 3DVAR; (b) hybrids built using the multiphysics ensemble; (c) hybrids built using SisPI's ensemble of solutions.

The results coincide, in the case of 3DVAR, with the initialization of warmer environments according to the model.

In the experiments developed with 3DVAR the radiances assimilation, individual and combined, led to warmer environments forecasts with increments thresholds between 0.2 and 0.4°K (Fig. 11a). On the contradictory, with an individual assimilation of prepbufr data, a slight cooling is observed in the layer below 975 hPa with an equally very limited increase above this level. For the 3DVAR_P case, the assimilation contribution did not exceed the threshold of $\pm 0.1^\circ\text{K}$.

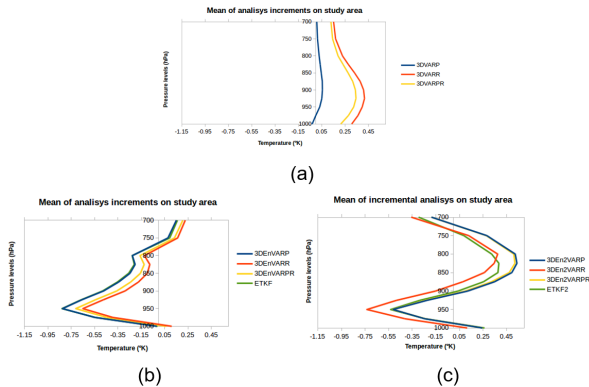


Figure 11. Incremental analysis of temperature for the different assimilation schemes applied. (a) 3DVAR; (b) hybrids built using the multiphysics ensemble; (c) hybrids built using SisPl's suite of solutions.

The hybrid techniques built from the multiphysics ensemble generated a maximum cooling around the surface of 950 hPa, with values around -0.6 and -0.8°K. A poor differentiation can be seen between the analysis field obtained from the different data combinations to be assimilated and even in relation to the method used, since the solutions obtained from 3DENVAR and ETKF were very similar. This fact, also observed in the case of relative humidity, suggests a strong influence of the first approximation on the assimilation process. (Fig. 11b).

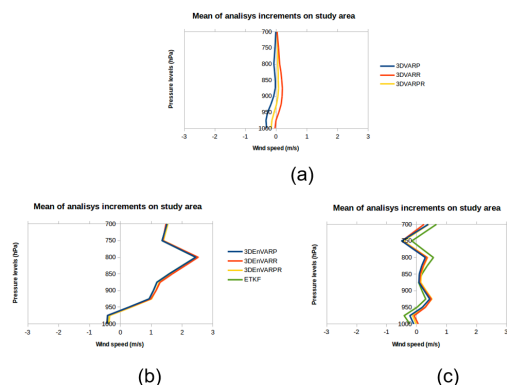


Figure 12. Incremental analysis of wind speed for the different assimilation schemes applied. (a) 3DVAR; (b) hybrids built using the multiphysics ensemble; (c) hybrids built using SisPl's suite of solutions.

The contributions, in relation to wind speed followed the trend appreciated in the previous variables. The 3DVAR_P combination resulted in a reduction of the wind force in the 1000 to 700 hPa layer with mean values between -0.3 and -0.04 m/s. The 3DVAR_R and 3DVAR_PR showed an increase in the surface environment of 950 hPa compared to the run without assimilation, in this sense the 3DVAR_R variant predicted the

highest increases of wind speed with the height and therefore an initial environment slightly more sheared (Fig. 12a).

The 3DENVAR and ETKF designs generated initial environments with lower wind speeds regarding without assimilation run. However, forecasting increases of the speed above the surface of 950 hPa, which reached a maximum of 2.5 m/s, that means a slightly sheared environment. Those results were different in relation to the 3DEN2VAR and ETKF2 schemes which led to discrete contributions comparable to 3DVAR, with wind speed decreases below the surface of 950 hPa.

III.5. Impact on surface forecast

The contributions generated by the different assimilation schemes generated more or less favorable environments for the appearance of the phenomenon object of study, which caused different impacts on the surface forecasts. The proposed assimilation techniques predicted environments less warm than the solution without assimilation, however the observed differences do not exceed 0.5°K (Fig. 13a).

In relation to the dew point depression, the purely variational scheme tends to reduce the mean square errors with the forecasting time advance, slightly improving the solution without assimilation. However, the hybrid systems show a limited impact on the forecast, since after the first three hours the errors are even higher than the run without assimilation.

In relation to relative humidity, the 3DVAR method predicted a more realistic initial environment and, although the differences with respect to solution without assimilation were low, it showed an increase rate of the relative humidity in surface higher than the one obtained with the hybrid methods. The best results were obtained with the 3DVAR_P experiment. Precisely, the solution of the hybrid schemes in a general sense showed greater precision in the initialization, but can be observed a decreasing performance after the three first forecasting hours with relative humidity underestimations up to close to 8% around 09:00 UTC, time of higher intensity of the episode, as it was already expressed (Fig. 13b).

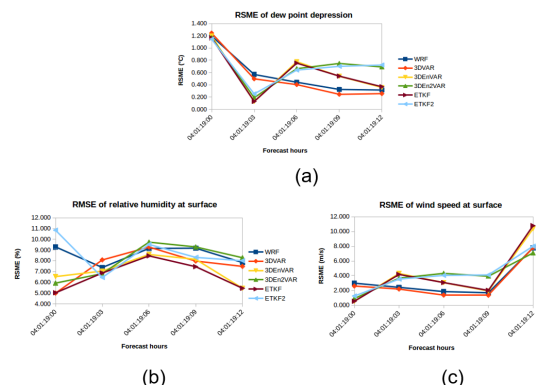


Figure 13. Behavior of (a) temperature forecasts; (b) relative humidity; (c) wind speed between 00:00 and 15:00 UTC for all experiments.

For the surface wind speed case, the 3DVAR_P experiment shows the most realistic results, although the 3DVAR method

reduced in general the wind speeds on the surface. The hybrid methods built from the multiphysics ensemble achieved a more successful forecast in the initialization stage at surface, with absolute errors at the time of initialization around 0.19 m/s, the lowest. However, during the following hours, the mean absolute errors grew in a 1.5 and 2.5 m/s threshold, top reached at 09:00 UTC. The hybrid methods built from the previous runs were characterized by an overestimation of the mean wind speed at the initialization time and they were even worse than the run without assimilation (Fig. 13c).

III.6. Binary analysis with Cvis algorithm

The application of the different assimilation techniques led, in some cases, to obtaining fog forecasts over the study area something that, as it was previously explained, did not achieve the without assimilation solution.

The late forecasting of the phenomenon around 06:00 UTC persisted with the 3DVAR technique. It differs from the solution without assimilation as its beginning consisted of a moderate to strong haze episode forecasting the fog event appropriately at 12:00 UTC in most cases. The delay in the fog appearance is related to a weakening of the phenomenon around 09:00 UTC, a result consistent with the characteristics of a more hostile environment previously described. The use of radiances is conducive to an increase in false alarms related to the appearance of ephemeral fog events towards the coasts around 06:00 UTC and the overestimation of the intensity of the event towards the south coast weather stations around 12:00 UTC.

Table 4. CSI's behavior for different assimilation techniques during the first 12 hours of forecast.

Method	Fog	Haze	Fog + Haze
SisPI-NA	0	0.412	0.311
3DVAR_P	0.308	0.483	0.428
3DVAR_R	0.231	0.400	0.349
3DVAR_PR	0.231	0.448	0.381
3DEnVAR_P	0.143	0.355	0.289
3DEnVAR_R	0.231	0.355	0.318
3DEnVAR_PR	0.231	0.375	0.333
3DEn2VAR_P	0.167	0.355	0.302
3Den2VAR_R	0.333	0.448	0.415
3DEn2VAR.PR	0.200	0.333	0.289
ETKF	0.167	0.364	0.311
ETKF2	0.077	0.387	0.289

Hybrid methods that use the multiphysics ensemble also showed difficulties, mainly when forecasting in the stations near the north coast (78325-78376-78318) generating miss values higher than 3DVAR and the solution without assimilation. Those methods showed more difficulties than 3DVAR to detect fog events.

Finally, the methods which use like first guess the previous runs of SisPI exhibited better results than the multiphysics ensemble but its were not result in higher performance than 3DVAR. In this case, the prepbufr data combinations leads to worst forecast, being the radiance data individually

assimilated the one that obtained better detection rates of fog, thanks to a more accurate forecast towards the north coast. On the other hand, the forecast over inner region of the study area did not achieve relevant results.

Since the CSI is a value that summarizes the relationship between successful detections, failures, and false alarms, the (Table 4) also summarizes the values of this index for all assimilation schemes considering individually the fogs and hazes as well the combination of both phenomena.

IV. CONCLUSIONS

In a conclusive way it can be stated that the assimilation of data improves the forecast of episodes of fog and/or haze in short and very short terms. The greatest impacts were observed in fog forecast. However, the applied methods not able to significantly improve the tendency to underestimate relative humidity and overestimate temperature and wind speed.

The schemes that used the 3DVAR method led to a minor modification of the initial field in relation to the hybrids. It could be observed in the multiphysics ensemble experiments that the multiphysics first guess has a determinant impact in the assimilation results, as a consequence, the influence of the type of data or even the method turn up irrelevant because in those cases at 3DEnVAR and ETKF techniques the error curves and incremental analysis are superimposed.

Hybrid methods in general show a limited temporary assimilation impact of approximately to around 3 hours, with rapid transitions towards the solution without assimilation after this time, contrary to 3DVAR, which extends its influence a few hours more over forecasting time. Here the influence of the generic covariance error can be detrimental to hybrid schemes, which suggests exploring the use of domain-dependent static matrices (which increases the computational cost of the method) and evaluating the cost-benefit ratio.

The individual use of prepbufr data seems to be sufficient to improve the fog and/or haze forecast in short and very short terms being the 3DVAR method the most appropriate selection, as the impact of assimilation seems to spread more over time than hybrid methods and it is less computationally expensive.

An increase in the study cases and modifications in the configuration of the assimilation methods, such as the generation of a domain-dependent covariance matrix, or modifications of the weight of the dependent flow errors with in respect to static background in the case of the hybrid schemes, could provide more concrete results in order to achieve a more effective short and very short terms fog/haze forecast.

REFERENCES

- [1] B. A. Kunkel, J. Clim. Appl. Meteorol. **23**, 34 (1984).
- [2] A. Talamo, J. Nucl. Mater. **373**, 407 (2008).
- [3] J.A. Doran, P.J. Roohr, D.J. Beberwyk et al., The MM5 at the Air Force Weather Agency — New products

- to support military operations. The 8th Conference on Aviation, Range, and Aerospace Meteorology, NOAA / NWS, Dallas, Texas (1999).
- [4] I. Gultepe, M. D. Müller, Z. Boybeyi, J. Appl. Meteorol. Climatol. **45** (2006).
- [5] C. H. Bang, J. W. Lee, and S. Y. Hong, Korean Soc. Atmos. **24**, 92 (2009).
- [6] G. Creighton, E. Kuchera, J. McCormick, S. Rentschler, B. Wickard, AFWA Diagnostics in WRF, (2014) (Available online at <https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/>).
- [7] W. C. Skamarock et al., A description of the advanced research WRF version 3, NCAR Tech., 125 (2008) (Available online at http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v3.pdf).
- [8] C. Román-Cascón, C. Yagüe, M. Sastre, G. Maqueda, Adv. Sci. Res. **8**, 11 (2012), DOI:10.5194/asr-8-11-2012.
- [9] C. Lin, Z. Zhang, Z. Pu and F. Wang, Numerical Simulations of an Advection Fog Event over Shanghai Pudong International Airport with the WRF model **31**, 874 (2017), (Available online at <https://www.researchgate.net/publication/320820726>)
- [10] N. Franciscatto, F. Puhales, V. Anabor, E. Dal Piva, E. Nascimento, Revista do Centro de Ciências Naturais e Exatas **37**, 613 (2015), DOI:10.5902/2179-460X17277.
- [11] C. Chen, M. Zhang, W. Perrie, R. Chang, X. Chen, P. Duplessis and M. Wheeler, Earth and Space Science **7**, (2020), DOI:10.1029/2019EA000703
- [12] M. Sierra, A. Ferrer, R. Hernández, Y. González, R. Cruz, I. Borrajero, C. Rodríguez, Sistema de Predicción a muy corto plazo basado en el Acoplamiento de Modelos de Alta Resolución y Asimilación de Datos, Informe de resultado, Programa: “Meteorología y Desarrollo Sostenible del País”, (2014), DOI:10.13140/RG.2.1.2888.1127.
- [13] F. Wang et al, Assimilating MTSAT-Derived Humidity in Nowcasting Sea Fog over the Yellow Sea. (2013), DOI:10.1175/WAF-D-12-00123.1.
- [14] X. Gao, S. Gao, Y. Yang, Preprints, (2018), DOI:10.20944/preprints201807.0577.v1.
- [15] S. Remy and T. Bergot, Meteorol. Weather Res. **138**, (2009), DOI:10.1175/2009MWR3110.1.
- [16] A. P. Alfonso, A. Florido, El clima de Matanzas, (Editorial Academia, La Habana, 1993) pp. 113.
- [17] E. L. Álvarez, M. I. Borrajero, M. R. Álvarez and L. A. León, Rev. Cienc. Tierra y Espacio **12**, 31 (2011).
- [18] I. Maiello, R. Ferretti, S. Gentile, M. Montopoli, E. Picciotti, F. S. Marzano and C. Faccani, Atmospheric Measurements Techniques, (2014), DOI:10.5194/amt-7-2919-2014.
- [19] V. Mazarella, I. Maiello, V. Capozzi, G. Budillon and R. Ferretti, Adv. Sci. Res. **14**, 271 (2017), DOI:10.5194/asr-14-271-2017.
- [20] D. Barker et al, Meteor. Soc., **93**, 831 (2012).
- [21] X. Wang, D. M. Barker, C. Snyder and T. M. Hamill, Mon. Wea. Rev. **136**, 5116 (2008).
- [22] X. Wang, D. M. Barker, C. Snyder and T. M. Hamill, Mon. Wea. Rev. **136**, 5132 (2008).
- [23] M. Tong, J. A. Sippel, V. Tallapragada, E. Liu, C. Kieu, I. Kwon, W. Wang, Q. Liu, Y. Ling and B. Zhang, Mon. Weather Rev. **146** 4155 (2018).
- [24] C. Bishop, B. J. Etherton, S. J. Majumdar, Mon. Weather Rev. **129**, (2000).
- [25] A. Pérez, I. Mitrani and O. Díaz, Sistema de Predicción Numérica Océano-Atmósfera para la República de Cuba, (Informe de Resultado Científico, Instituto de Meteorología, Centro de Física de la Atmósfera, 2014), (Available online at <https://modelos.insmet.cu/static/models/docs/>).
- [26] C. Schwartz, Z. Liu, X. Huang, Y. Kuo and C. Fong, Comparing limited-area 3DVAR and hybrid variational-ensemble data assimilation methods for typhoon track forecasts: sensitivity to outer loops and vortex relocation, (2013), DOI:10.1175/MWR-D-13-00028.1.
- [27] OMM, Vocabulario Meteorológico Mundial **182**, 784 (1992).
- [28] G. Acosta, Caracterización de las nieblas para cinco estaciones del occidente de Cuba en el período 2000-2009, Tesina del Diplomado de Física de la Atmósfera, UDICT, Instituto de Meteorología, (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.



COMPARISON OF THE NEUTRONIC BEHAVIOR OF A PWR TYPE SMR CORE USING CERMET AND TRISO FUEL

COMPARACIÓN EN EL DESEMPEÑO NEUTRÓNICO DEL NÚCLEO DE UN SMR DE TIPO PWR USANDO COMBUSTIBLE CERMET Y TRISO

J. ROSALES^{a†}, J.L. FRANÇOIS^a AND C. GARCÍA^b

a) Universidad Nacional Autónoma de México, México; rosales.j.84@gmail.com[†]

b) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Universidad de la Habana, Cuba

[†] corresponding author

Recibido 30/7/2022; Aceptado 10/11/2022

The use of non-conventional fuels in traditional Light Water Reactors (LWR) improves their performance in safety, as well as the characteristics of the fuel cycle. Using TRISO (Tristructural Isotropic) or SCF (Spherical Cermet Fuel) particles in a PWR-type (Pressurized Water Reactor) SMR (Small Modular Reactor) core enhances the proliferation resistance, fission products retention and greatly simplifies safeguards oversight. It has been shown that using TRISO fuel at low coolant temperatures can cause swelling induced by irradiation in the SiC barrier, so the use of another type of fuel without this issue and with equivalent neutronic performance to that obtained when TRISO fuel is used, may be more suitable for use in these types of plants. This work compares the neutronic performance of a PWR-type SMR core, using SCF particles with the same core using TRISO fuel in terms of burnup, spectrum, and radial power distributions. TRISO fuel has better multiplicative properties than SCF particles. Using SCF particles, the cycle duration decreases by approximately 8 %, a difference that is lower when the fuel mass is increased. The differences in the spectrum are higher in the thermal zone. The radial power distributions at the beginning of the cycle and at the end of the cycle are similar. Pu-239 production is higher when TRISO fuel is used.

El uso de combustibles no convencionales en los Reactores de Agua Ligera (LWR) tradicionales mejora el desempeño en seguridad, así como en las características del ciclo de combustible. Usando partículas TRISO (Tristructural Isotropic) o SCF (Spherical Cermet Fuel) en un SMR (Small Modular Reactor) de tipo PWR (Pressurized Water Reactor) mejora la resistencia a la proliferación, la retención de los productos de fisión y simplifica considerablemente la supervisión de salvaguardia. Se ha demostrado que con el uso del combustible TRISO a bajas temperaturas del refrigerante se puede producir un hinchamiento por irradiación en la barrera de SiC, por lo que el uso de otro tipo de combustible sin este problema y con un desempeño neutrónico equivalente al obtenido con el combustible TRISO puede ser más adecuado para este tipo de plantas. En este trabajo, se realiza una comparación en el desempeño neutrónico de un núcleo de un SMR de tipo PWR usando combustible SCF y el mismo núcleo utilizando combustible TRISO en términos de quemado, espectro y distribuciones radiales de potencia. El combustible TRISO presenta mejores propiedades multiplicativas que las partículas de SCF. Con el uso del combustible SCF, la duración del ciclo de combustible disminuye aproximadamente en un 8 %, siendo esta diferencia menor cuando aumenta la masa del combustible. Las diferencias en el espectro son mayores en la zona térmica. Las distribuciones radiales de potencia al inicio y final del ciclo son similares. La producción de Pu-239 es mayor cuando se utiliza combustible TRISO.

PACS: Nuclear reactors (reactores nucleares), 28.41.-i; Theory and simulation of nuclear reactors (teoría y simulación de reactores nucleares), 28.41.Ak; Nuclear engineering (ingeniería nuclear), 28.20.Ka.

I. INTRODUCCIÓN

The study and development of SMR worldwide has had high growth in recent years. Currently, the cost of large nuclear plants (\$kW) has grown greatly due to the necessary improvements in terms of safety and performance, thus only a few manufacturers remain in operation. In addition, the time between the signing of the contract and the start of energy production exceeds ten years. SMR technology emerges as a solution to many of these issues in nuclear power today: it has many similar design features to previous designs, reasonably short construction times, and greater design simplicity. Besides, they can be used and designed for different purposes such as energy production (Light Water Reactor type), as well as for applications such as reproduction, and waste management. The latter uses different types of

coolants and fuels in their designs and are implemented for a longer term [1]. Most SMR manufacturers are not present in the large nuclear power plant market and newcomers to the nuclear power plant market have joined to bring SMRs to the world market. Moreover, many countries with emerging economies cannot afford the implementation of large nuclear plants, but they can compete in the SMR market.

The construction of SMRs for short-term energy production are mostly LWR type, taking into account the accumulated operating experience, and the reliability and performance presented for this kind of reactors. In order to increase the safety levels of PWR-type SMRs, several types of fuels have been studied, as is the case of TRISO fuel. TRISO particle is comprised of an inner sphere where fuel is located called "kernel", and four more layers: one layer of porous carbon (Buffer), two layers of pyrolytic carbon (IPyC and OPyC) and

one layer of SiC. All TRISO particles are embedded in a matrix of SiC called “Packing Matrix”. This fuel, originally designed for gas-cooled reactors, maintains its integrity at very high temperatures (up to 1600 °C), has an excellent performance in retaining fission products at high burnup levels and very high temperatures, as well as very good properties from the neutronic and thermohydraulic point of view [2–8]. The use of this type of fuel in a PWR-type SMR core allows the use of extended fuel cycles, increasing the safety levels of the core both in safe operation and in the event of an accident.

In several studies [7, 9–11], the performance of a PWR-type SMR core using TRISO fuel has been studied. This innovative core joins the design characteristic of PWR and gas-cooled reactors like moderator materials, enrichment, etc. Safety criteria like reactivity coefficients are met when TRISO particles are used in this core [12].

In [7], new studies are carried out on the conceptual design of a PWR-type SMR core, with TRISO fuel. Using a 2ⁿ factorial design, some design parameters are optimized, such as enrichment, packing fraction, kernel size, to achieve an extended fuel cycle of approximately 1400 days. With the new configuration, the reactor can operate for 1,355 days in a critical state, reaching an average burnup of 65MW/kgU. In addition, temperature distributions are obtained in the zones of interest (fuel, clad, gap and coolant), which are well below the safe operation limits for this type of fuel. The reactor can operate without reaching the temperature limits established for safe operation even with a loss of coolant flow of 40 %.

However, it has been studied that using TRISO fuel at low coolant temperatures (about 260°C or below), the TRISO fuel particles may present a significant irradiation-induced swelling in the SiC coating outer layer of the particle during burnup [13, 14]. For reactors designed to work under these thermohydraulic conditions, another type of fuel is proposed, in which all the graphite layers are eliminated and the UO₂ kernels are embedded in a Zr matrix which is then coated with a protective outer layer of Zr to form the fuel assemblies [13, 15]. SCF coated particles were proposed in [16] and presents good retention of fission products, low fuel temperatures, high conductivity at thermal energies and good performance at high burnup.

As can be seen in Table 1 the inlet coolant temperature designed for the reactor is 188°C and the outlet coolant temperature is 212°C. Therefore, the main goal of this work is to study the performance of a PWR type SMR core, with SCF particles and make a comparison with the results for the core using TRISO particles [7], in terms of burnup, spectrum, power distributions and temperature distributions.

The paper is organized as follows: in Section 2, the computational models used for the neutronic simulation of the core and the main parameters of the TRISO and SCF particles are presented. In Section 3 a comparison of the performance of the core using both fuel particles is performed and in Section 4 the conclusions of the work are summarized.

II. MATERIALS AND METHODS

The reactor’s core simulated in our work is designed to maintain criticality for approximately 1400 days. It produces 25 MW of thermal power and have 45 control rods of hafnium to control the reactivity. The core has a radius of 110 cm and is surrounded by a beryllium reflector, which has an 8 cm thickness. The core also has two water axial reflectors of 20 cm of thickness each. As the fuel particles of TRISO and SCF have different sizes, a modification in the packing fraction must be made to obtain the same fuel mass at the beginning of the cycle. The main parameters of the core are summarized in Table 1 and Fig. 1 show the cross section of the fuel element using SCF and TRISO particles respectively. The rest of the material and geometric characteristics remain unchanged from those reported in [7]. SCF particles has a radius of 250 μm surrounded by a Zr layer of 25 μm of thickness to form a particle with a diameter of 550 μm [13,16]. The fuel element has a matrix of Zr of 0.97 cm of radius and an outer coating layer of Zr with a thickness of 0.03 cm.

Table 1. Most important parameters of the SMR core.

Parameter (Unit)	Value	Parameter (Unit)	Value
Pin diameter (cm)	2	Packing matrix material TRISO/SCF	SiC / Zr
Fuel	TRISO / SCF	Coolant	water
Enrichment (%)	15	Inlet / Outlet Temperature (C°)	188 / 212
TRISO / SCF packing fraction (%)	30 / 7.5	Flow mass (kg/s)	223.71
Particles per pin TRISO / SCF	220400 / 380852	Pressure (MPa)	6
Particle outer radius (cm) TRISO / SCF	0.0535 / 0.0275	Core height (cm)	150

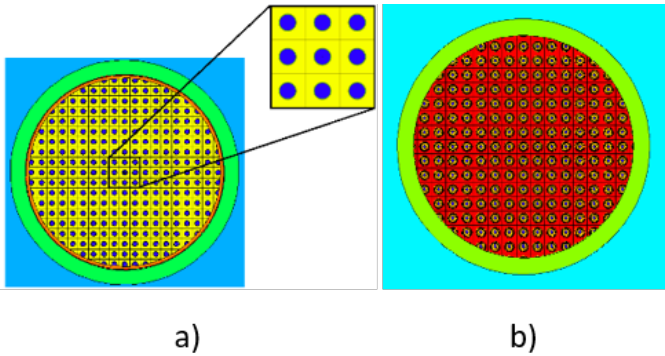


Figure 1. Cross section of the fuel element.

All simulations were carried out using the SERPENT code, Version 2.1.27. This code, based on probabilistic methods, allows the calculation of burnup, power distributions and fuel cycle analysis [17]. ACE format cross-section libraries based on JEF-2.2, JEFF-3.1, JEFF-3.1.1, ENDF/B-VI.8, and ENDF/B-VII evaluated data files are included in the code. Here, JEFF 3.1 library for the cross sections description for all the materials were used.

The use of probabilistic code is more suitable for this kind of problems due to the geometry complexity and the number of zones and materials to be simulated. All the calculations were made with 10,000 histories per cycle and 500 cycles, skipping the first 30, ensuring standard deviation values below 100 pcm in Keff.

Core simulation using random, hexagonal and cubic distributions of the TRISO particles inside fuel elements were made [18, 19]. According with this calculations, there are no significant differences in the results of Keff, power distributions, spectrum, using uniform distributions (Body-Centered Cubic (BCC) or Faced-Centered Cubic (FCC)) or a random distribution to simulate the TRISO particles inside the fuel elements on core scale. Furthermore, the cut effect given by the intersection of the fuel element surface and the TRISO particles surfaces was also analyzed, and the results were similar. According with this results, the use of a BCC lattice to simulate the TRISO particles inside the fuel rods was considered suitable.

III. RESULTS AND DISCUSSION

III.1. Burnup characteristics

The evaluation of multiplicative properties, for the whole core at the Beginning of Life (BOL) state, for both types of fuel was carried out. All calculations were performed for the same temperatures at the kernel and in the coating layers. For these conditions, an initial Keff of 1.25283 (24) using SCF, which is 1.36 % lower than the Keff value obtained using TRISO fuel (1.27004 (24)), reported in [7]. Fig. 2 shows the capture and elastic dispersion cross section for both packing materials.

It can be seen that SiC material has higher elastic dispersion cross sections and lower capture cross sections for almost all the studied energies. For these reasons, the reactor has better multiplicative properties using TRISO fuel particles compared with the reactor using SCF particles. The top subfigures of Fig. 3 show the neutronic spectrum for equal interval of lethargy at BOL and End of Life (EOL) states, and lower subfigures show the differences (%) of the flux values at the studied energies. Those differences were calculated using Eq. 1:

$$\text{Difference}(\%) = \frac{\phi(\text{TRISO}) - \phi(\text{SCF})}{\phi(\text{SCF})} \cdot 100 \quad (1)$$

Where $\phi(\text{TRISO})$ is the obtained flux value for a given energy, when TRISO fuel is used and $\phi(\text{SCF})$ is the obtained flux value

for the same energy, when SCF is used.

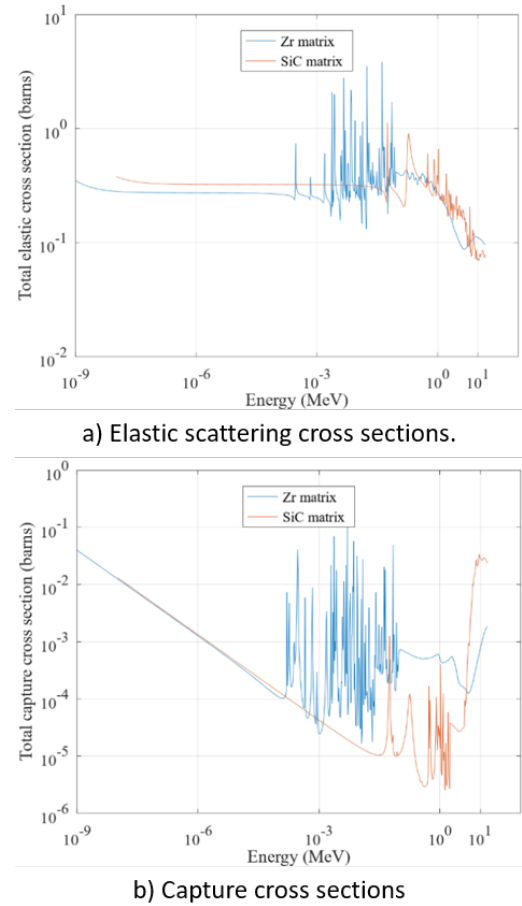


Figure 2. Microscopic cross sections for SiC and Zr.

This distribution of the relative differences has a positive trend to energies lower than $3e-7$ MeV, meaning that the neutron flux is higher at those energies when TRISO fuel is used. In the region between $3e-7$ MeV and 1 MeV, there is a change in the behavior of the neutron flux, having a negative trend in the differences. To higher energies, TRISO fuel presents a higher neutron flux.

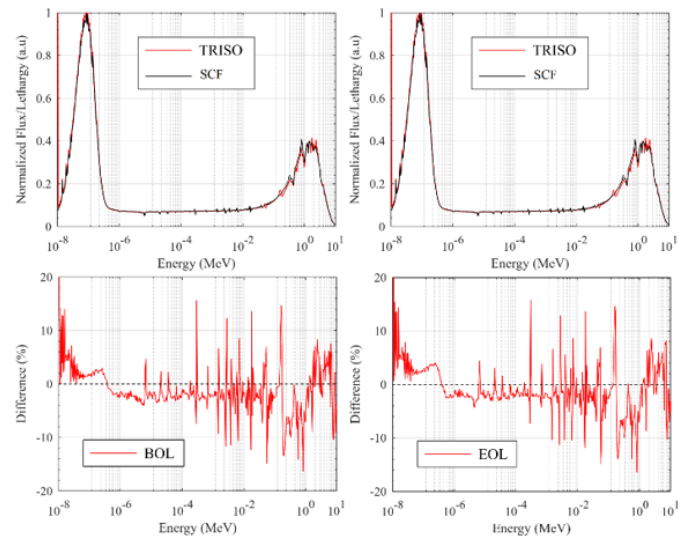


Figure 3. Core spectrum (Up) and spectrum relative differences (Down) for the BOL and EOL states.

This behavior at differences is the same in both, BOL and EOL stages. The results in this work are in agreement with those obtained in [13] a similar study, although the differences obtained in that work are higher.

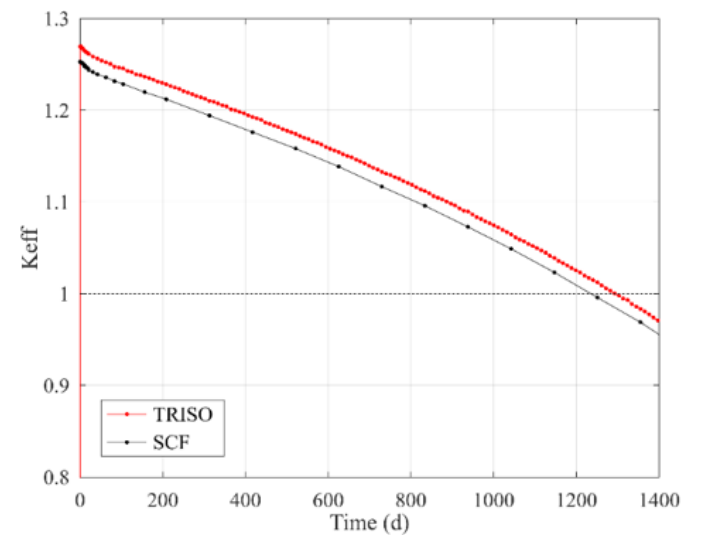


Figure 4. Keff variation along the operating time.

In Fig. 4, the variation of Keff along the operational time, for TRISO and SCF is shown. The operational time using TRISO fuel is approximately 1355 days, achieving a degree of burnup of 65 MWd/kgU. With the use of SCF, the operational time decreases in approximately 7 % (1265 d), achieving a degree of burnup of 60 MWd/kgU. This result is given by the fact that in the Zr matrix exists more absorptions without fission than in the SiC matrix, decreasing the neutron economy, and thus, Keff value. On the other hand, although the differences are slight, the Instantaneous Conversion Ratio (ICR) using TRISO fuel is higher than the one obtained for the SCF, as it is shown in Fig. 5, with a maximum difference of 8.75e-4 at 60MWd/kg. ICR takes into account the mass of U-233, Pu-239, Pu-241, and U-235 on each burnup step.

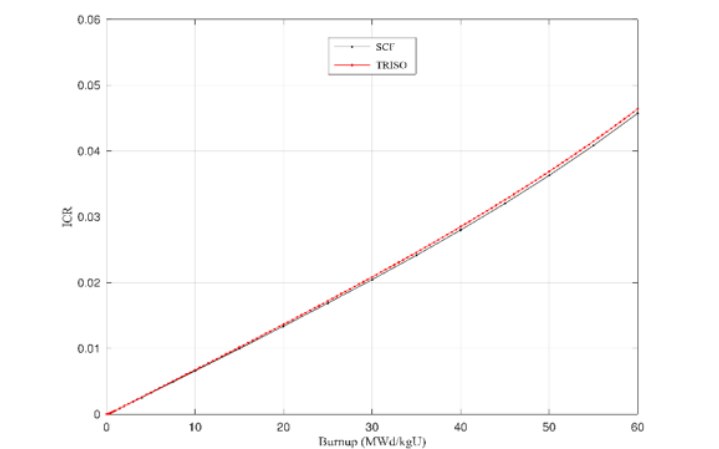


Figure 5. Keff variation along the operating time.

In Fig. 6, the variation of the masses of the main fissile isotopes considered in the ICR factor are shown. The isotopes which have higher differences are U-238 and Pu-239. The variation

of the masses of Pu-241 and U-235 are very similar.

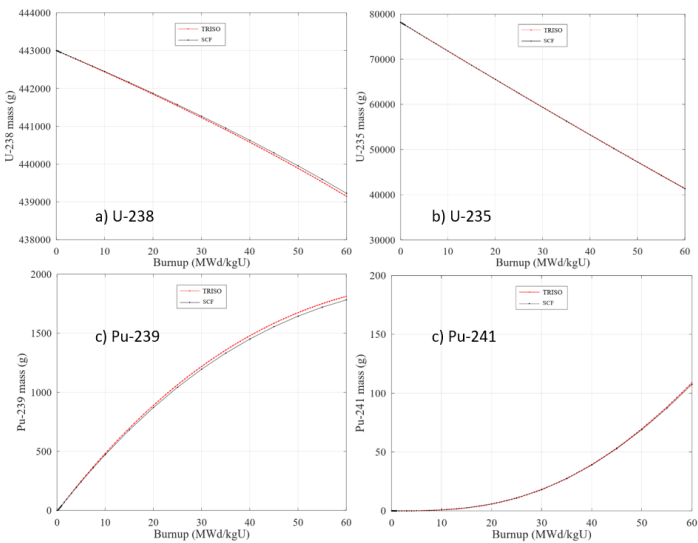


Figure 6. Mass variation of the main isotopes with burnup.

III.2. Redesign calculations

According to the previous results, using SCF does not achieve the cycle duration of approximately 1400 days. Assuming that the nuclear plant has a capacity factor of 0.95 (an assumption made for the core using TRISO fuel) [7], the cycle must have a duration of 1330 days. For this reason, the configuration of the core must be changed to achieve the established cycle duration. Taking into account that the fuel enrichment used is high, the first study made was the variation of the enrichment, keeping constant the amount of fissile material in the core. This can be achieved by increasing the number of fuel particles and therefore the packing fraction value.

Table 2. Cycle parameters for different enrichments using SCF.

Enrichment (%)	Packing Fraction (%)	Initial Keff (S.D)	Burnup (MWd/kgU)	EFPD (d)
9	12.4	1.22405 (24)	35.0	1209.1
12	9.4	1.24055 (24)	51.9	1228.8
15	7.5	1.25283 (24)	60.0	1265

In Table 2 are presented the results of this study where it can be seen that a decrease in the enrichment of the fuel results in a decrease of the initial Keff value, a decrease in the Effective Full Power Days (EFPD) and therefore a decrease in the degree of burnup achieved. Thus, using a lower enrichment and more particles in the fuel element is not the solution to increase the EFPD.

To achieve the established cycle duration, the packing fraction was increased keeping constant the fuel enrichment of 15 %. The packing fraction for the SCF was increased to 8 %. With this new configuration, the core achieves a burnup degree of 65MWd/kgU, with a cycle duration of 1448 days. To evaluate the core performance with this new composition, a comparison with the core using TRISO fuel was made. Thus,

the packing fraction for the core using TRISO particles was increased to obtain the same initial fuel mass. Table 3 shows the values of the cycle parameters for the new composition of the core. There is a difference in the cycle duration of barely 1 % and a difference in the burnup degree of 0.6 MWd/kgU which is lower than the differences obtained in the previous composition.

With the changes in the packing fraction, the spectrum becomes more similar between the two types of fuel, making the differences between them in the thermal zone less significant, as can be seen in Fig. 7.

Table 3. Cycle parameters for the two fuel types with the new configuration.

	Enrichment (%)	Packing Fraction (%)	Initial Keff. (S.D)	Burnup (MWd/kgU)	EFPD (d)
TRISO	15	32	1.28719 (24)	65.6	1461
SCF	15	8	1.27555 (24)	65	1448

Radial power distributions at BOL state were calculated for each type of fuel, and the distributions of the produced power are very similar, with a maximum value of the radial peak factor of 1.80 (Fig. 8). This value is high compared with the power peak for a PWR's core. But this value does not represent a limitation from the thermohydraulic point of view, taking into account that in [7] a value of 1.78 was obtained, and with this value, the core can withstand up to 40 % of loss of coolant without reaching the limit temperature value for safe operation.

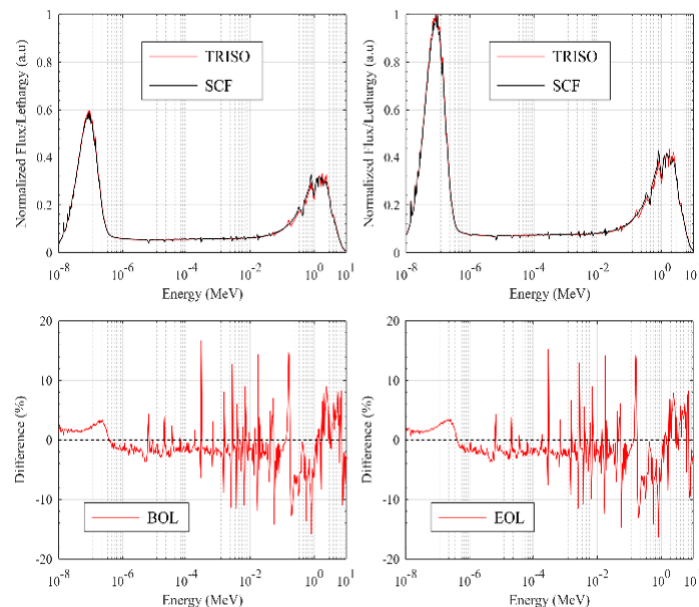


Figure 7. Core spectrum (Up) and spectrum relative differences (Down) for the BOL and EOL states (Redesigned core).

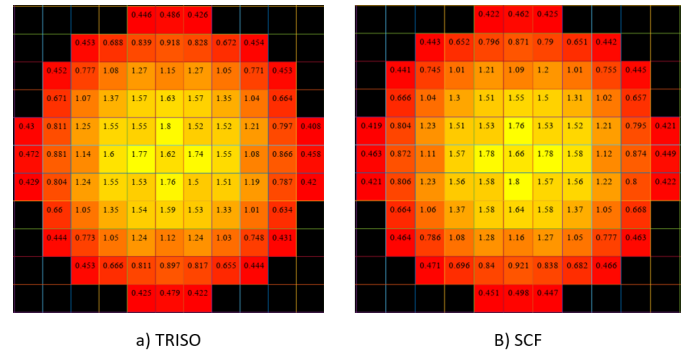


Figure 8. Radial power distributions at BOL state.

IV. CONCLUSIONS

A comparison of the neutronic performance of a PWR-type SMR core using both, TRISO and SCF particles was made. With the initial configuration, a lower value of Keff was obtained using SCF particles. The fuel cycle duration decreases by 7 % compared with the core using TRISO particles. That is given by the better moderation properties of the SiC packing matrix, compared with the Zr packing matrix. ICRs are very similar in both cases. As the cycle duration using SCF particles does not fulfill the requirements of design, a modification was made in the initial configuration. Since a decrease in the enrichment with a higher packing fraction does not increase the cycle duration, the packing fraction value was increased from 7.5 % to 8 %, with 15 % of enrichment. With this change, the cycle duration using SCF particles can achieve 1448 days and the differences in the core performance using both fuel particles are lower. Using SCF, the core has good neutron performance and meets the design goals. According to these results and the study of the thermohydraulic behavior, its use in this reactor may be more suitable than TRISO, since it does not present the structural problems of the latter.

Future works in this topic are carried out in order to evaluated the performance of the core, based on a coupled neutronic and thermohydraulic study of the critical assembly, safety coefficient calculations and reactivity control mechanisms.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the "Universidad Nacional Autónoma de México" for the postdoctoral fellowships of Jesús Rosales, and for the support through the research project: Nuclear reactors and nuclear fuel cycles, and for facilitating the use of the MIZTLI supercomputer under the LANCAD-UNAM-DGTIC-253 project.

REFERENCES

- [1] M. D. Carelli and D. T. Ingersoll, Handbook of small modular nuclear reactors, (2014).
- [2] A. Talamo, J. Nucl. Mater. **373**, 407 (2008).
- [3] W. J. Kim, J. N. Park, M. S. Cho, and J. Y. Park, J. Nucl. Mater. **392**, 213 (2009).

- [4] IAEA, Performance Analysis Review of Thorium TRISO Coated Particles during Manufacture, Irradiation and Accident Condition Heating Tests, (2015).
- [5] L. L. Snead, T. Nozawa, Y. Katoh, T. S. Byun, S. Kondo, and D. A. Petti, *J. Nucl. Mater.* **371**, 329 (2007).
- [6] D. W. McEachern, W. Wu, and F. Venneri, *Nucl. Eng. Des.* **251**, 102 (2012).
- [7] J. Rosales, J. L. François, A. Ortiz, and C. García, *Nucl. Eng. Des.* **387**, (2022).
- [8] L. García, J. Pérez, C. García, A. Escrivá, J. Rosales, and A. Abánades, *Nucl. Eng. Des.* **253**, 142 (2012).
- [9] A. Khan, A. Hussain, H. Rehman, and M. Ahmad, *Prog. Nucl. Energy* **75**, 10 (2014).
- [10] A. Hussain and C. Xinrong, *Prog. Nucl. Energy* **52**, 531 (2010).
- [11] Q. Deng et al., *Nucl. Eng. Technol.* **54**, 3095 (2022).
- [12] A. Hussain and C. Xinrong, *Prog. Nucl. Energy* **53**, 76 (2011).
- [13] Abdelfettah Benchrif, *SOP Trans. Theor. Phys.* **2014**, (2014).
- [14] IAEA, Small Reactors without On-site Refuelling: Neutronic Characteristics, (Viena, Austria, 2010).
- [15] IAEA, Studies on fuels with low fission gas release, (Vienna, Austria, 1996).
- [16] D. J. Senor et al., A New Innovative Spherical Cermet Nuclear Fuel Element to Achieve an Ultra- Long Core Life for use in Grid-Appropriate LWRs, (Pacific Northwest National Lab, Washington D.C, USA, 2007).
- [17] J. Leppänen, M. Pusa, T. Viitanen, V. Valtavirta, and T. Kaltiaisenaho, *Ann. Nucl. Energy* **82**, 142 (2015).
- [18] J. A. R. Garcia, C. R. G. Hernández, C. A. Brayner, de O. Lira, J. Pérez-Curbelo, A. Muñoz-Oliva, D. Sánchez-Domínguez *Int. J. Nucl. Energy Sci. Technol.* **10**, 72, (2016).
- [19] J. Rosales et al., *Int. J. Nucl. Energy* **2014**, (2014).

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.



CONCEPTUAL DESIGN UPDATE OF A SMALL MODULAR REACTOR CORE USING TRISO FUEL

ACTUALIZACIÓN EN EL DISEÑO CONCEPTUAL DEL NÚCLEO DE UN REACTOR MODULAR PEQUEÑO USANDO COMBUSTIBLE TRISO

C. GARCÍA^{a†}, J. ROSALES^b, J. L. FRANÇOIS^b, R. GRANADOS^a AND H. MARTÍNEZ^a

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

b) Universidad Nacional Autónoma de México, México.

† corresponding author

Recibido 30/7/2022; Aceptado 10/11/2022

In recent years, the design of new prototypes of small modular reactors has generated a growing interest in the international scientific community. Their applications and versatility make them an attractive option among candidates considered in generation III+ and IV. The use of TRi-structural ISOtropic fuel (TRISO) in integral pressurized water reactors (iPWR) constitutes a challenge to achieve extended fuel cycles. To obtain high proliferation resistance, extended fuel cycles for the iPWRs have been proposed. Obtaining such a large cycle length, using low fuel enrichment, without shuffle, and with a relatively small core size, is a challenge for the neutronic design of the reactor core. Previous works have analyzed the characteristics of an iPWR using TRISO fuel with a power of 25 MWt. In this work, a full-core neutronic computational model based in SERPENT code was developed, allowing to describe the performance of the proposed reactor core configurations. The core neutronic update is made with the aim of increasing the thermal power. The radial power distributions, fuel cycle length and other parameters for the different variants are analyzed and compared.

En los últimos años, el diseño de nuevos prototipos de reactores modulares pequeños ha generado un creciente interés en la comunidad científica internacional. Sus aplicaciones y versatilidad los convierten en una opción atractiva entre los candidatos considerados en la generación III+ y IV. Por otro lado, el uso de combustible tipo TRISO en reactores integrales de agua a presión (iPWR) constituye un desafío para lograr ciclos de combustible extendidos. Para obtener una alta resistencia a la proliferación, se han propuesto ciclos de combustible extendidos para los iPWR. Obtener una longitud del ciclo tan grande, utilizando un bajo enriquecimiento de combustible, sin mover los conjuntos combustibles y con un tamaño del núcleo relativamente pequeño es un desafío para el diseño neutrónico del núcleo del reactor. Trabajos previos han analizado las características de un iPWR que utiliza combustible TRISO con una potencia de 25 MWt. En este trabajo, se desarrolló un modelo computacional neutrónico del núcleo completo basado en el código SERPENT, que permitió simular el desempeño de las configuraciones del núcleo del reactor propuestas. La actualización neutrónica del núcleo se realiza con el objetivo de aumentar la potencia térmica. Se comparan las distribuciones de potencia radial, la duración de los ciclos de combustible y otros parámetros, para las diferentes variantes analizadas.

PACS: Nuclear reactors (reactores nucleares), 28.41.-i; Theory and simulation of nuclear reactors (teoría y simulación de reactores nucleares), 28.41.Ak; Nuclear engineering (ingeniería nuclear), 28.20.Ka.

I. INTRODUCTION

The study of small modular reactors (SMR) has recently attracted a growing interest in the international scientific community. SMRs are characterized by their diverse applications and versatility, making them an interesting option among the possible candidates for Generation III+ and IV of new nuclear reactors.

The analyses of the performance of SMRs both for energy production and other applications is at the cutting-edge of nuclear energy due to the potential it represents in terms of safety, economy and energy flexibility.

Additionally, the use of TRISO fuel in PWR type reactors opens new possibilities in nuclear energy production. Each TRISO particle has a kernel where fuel is located. The kernel is surrounded by three layers of carbon and ceramic-based materials that prevent the release of radioactive fission products. TRISO fuels are structurally more

resistant to neutron irradiation, corrosion, oxidation and high temperatures than traditional reactor fuels. Specifically, its use in iPWR type modular reactors constitutes a challenge to obtain extended fuel cycles. One of the goals of the design of SMR is to achieve extended fuel cycle lengths, greater than the duration of the fuel cycles of standard nuclear reactors, which allows an increased proliferation resistance.

Previous works have analyzed the characteristics of an iPWR reactor using TRISO fuel with a power of 25 MWt. The main design features of this reactor are presented in [1,2].

In [2] a neutronic analysis was performed for a two effective full power years' operating cycle of a small PWR using TRISO fuel with a novel composition. The theoretical investigation of the use of TRISO fuel particles in PWR assemblies was originally reported in [3], where graphite was used as a moderator in a light water cooled PWR.

In [1], it was proposed a core design capable of operating for approximately four effective full power years (1400 days)

without needing refueling. The influence of some design parameters of the TRISO fuel (packing fraction –i.e, the volumetric fraction that TRISO particles occupy within the encapsulation material– enrichment, and kernel radius) on the effective neutron multiplication factor (K_{eff}) value was evaluated and a 2n multifactorial analysis was performed.

In [4], the neutronic performance of the SMR of 25MWt PWR-type, using Thorium in TRISO fuel in the form of duplex configuration was studied, considering the following parameters: cycle length, main isotopes' mass transmutation, moderator temperature coefficient, fuel temperature coefficient, and power distributions. To achieve this goal, three distribution cases of ThO_2 and UO_2 in TRISO particles inside the fuel rods were compared.

The very good neutronic performance of the proposed SMR of 25MWt PWR-type allows redesigning the core to achieve higher thermal powers while maintaining the same power density.

In this work, the neutronic redesign of the reactor core is analyzed with the aim of increasing the thermal power. The core is redesigned by increasing the axial and radial dimensions and both. The radial power distributions, the length of the cycles and other parameters for the different variants analyzed are compared. A computational model based on the Serpent code was developed to simulate the neutronic behavior of the reactor core designs.

II. MATERIALS AND METHODS

The reference reactor core is the SMR 25 MWt iPWR-type studied by other authors [1, 2, 5]. The distribution of fuel assemblies and fuel rods is depicted in Fig. 1. The reference core is composed of 89 fuel assemblies (FA), with the rods located in four different patterns. The design has 45 control rods to reduce the peak power factor, also help to keep the uniformity in fuel burnup, neutron flux, power distributions and the control of the reactivity. The diameter of the reference reactor core is 220 cm, with an active height of 150 cm. The core has three reflectors: a radial one composed of beryllium with a thickness of 8 cm and two axial ones of water with a thickness of 10 cm.

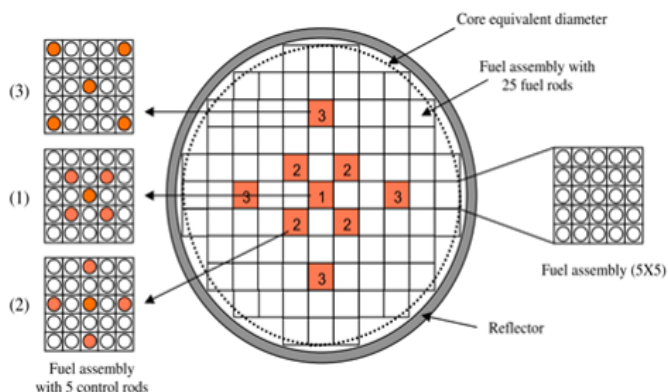


Figure 1. Schematic of the reference reactor core. The main reference design characteristics are summarized in Table 1.

Table 1. Reference core design parameters.

Parameter	Value/Unit
Power	25 MWth
Core height	150 cm
Core diameter	220 cm
Fuel pitch	3 cm
Fuel rod diameter	2 cm
Zircaloy Clad thickness	0.15 cm
No. of assamblies	89
Pattern	5x5
No. of control rods	45
Packing fraction	30 %
Enrichment (by weight of U-235)	15 %

The code used to perform the neutronic simulation of the core is Serpent, version 2.1.27 [6]. This is a multi-purpose, three-dimensional continuous energy Monte Carlo particle transport code. It is used to perform neutronic calculations like eigenvalue, burnup, fuel cycles, etc. Detailed information on the possibilities of the Serpent code can be found at [6–8]. Evaluated data files like JEF-2.2, JEFF-3.1, JEFF-3.1.1, ENDF/B-VI.8, and ENDF/B-VII are included in the code. In the particular case of our work, the nuclear data library JEFF-3.1 was used.

To increase the thermal power of the core, first the influence of increasing axial dimensions of the core in K_{eff} values was studied, maintaining the rest of the standard design parameters. The increase values in the axial dimensions of the core was chosen taking as reference height values of other SMR reactor cores of the iPWR type. Table 2 shows the K_{eff} values at the beginning of the life (BOL) for the different values of the analyzed core height.

Table 2. K_{eff} values vs. core height, keeping constant the number of FA (89).

Cases	Core height (cm)	Initial K_{eff}
1	150	1.28915 ± 0.00031
2	160	1.29182 ± 0.00031
3	170	1.29388 ± 0.00030
4	180	1.29729 ± 0.00028
5	190	1.29878 ± 0.00027
6	200	1.30007 ± 0.00028
7	210	1.30175 ± 0.00027
8	220	1.30363 ± 0.00030

To accomplish burnup studies by increasing the thermal power, five configurations were studied, besides the reference one 89 FA and 150 cm in height, varying axial and radial dimensions of reactor core. Two cases of axial elongation, that of 190 cm in height and that of 220 cm in height were analyzed. In addition, the radial increase in the dimensions of the core was considered, increasing the number of FA to 121 and 157. This allowed us to analyze three more cases, one with 121 FA and 150 cm in core height, another with 157 FA and 150 cm in height, and one case where the core dimensions' increase axially and radially, this is 157 FA and 220 cm in core height.

The core thermal power was increased proportionally to the

reactor core volume. The distribution of fuel assemblies and fuel rods is shown in Fig. 2 to the 157 FA and 220 cm core height case.

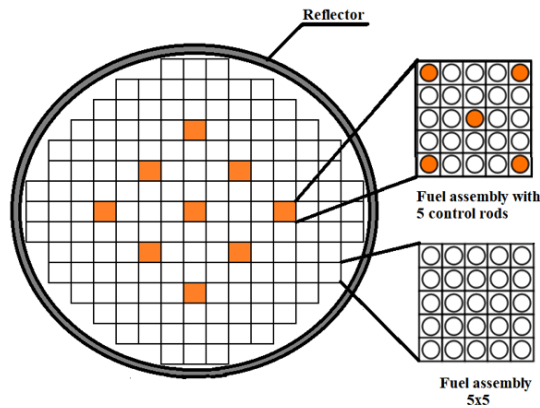


Figure 2. 157 FA and 220 cm core height case.

Table 3 gives the core volume values for the analyzed cases, as well as the thermal power values, pin total number, and the initial and final K_{eff} values (with the standard deviation) for a burnup value of 60 MWd/THM (3.45 years).

Table 3. Main parameters of the different cases analyzed.

Cases	Volume of reactor core (cm ³)	Power (MWth)	No. of rods	Initial/Final K_{eff} values $\pm$ S.D
Reference H=150 cm 89 FA	3003 750	25	2180	1.26354 $\pm$ 0.00057 1.00133 $\pm$ 0.00029
Axial elongation H=190 cm 89 Fa	3804 750	31.66	2180	1.27254 $\pm$ 0.00030 1.00849 $\pm$ 0.00027
Axial elongation H=220 cm 89 FA	4405 500	36.66	2180	1.27611 $\pm$ 0.00028 1.01312 $\pm$ 0.00027
Radial elongation H=150 cm 121 FA	4083 750	33.98	2980	1.28001 $\pm$ 0.00027 1.01729 $\pm$ 0.00028
Radial elongation H=150 cm 157 FA	5298 750	44.1	3880	1.29610 $\pm$ 0.00029 1.03138 $\pm$ 0.00024
Radial and axial elongation H=220 cm 157 FA	7771 500	65	3880	1.31011 $\pm$ 0.00026 1.03171 $\pm$ 0.00026

III. RESULTS AND DISCUSSION

The dependency of K_{eff} vs. the working time at nominal power (effective full power day, EFPD) was compared for

the different cases analyzed, in order to evaluate the fuel cycle length.

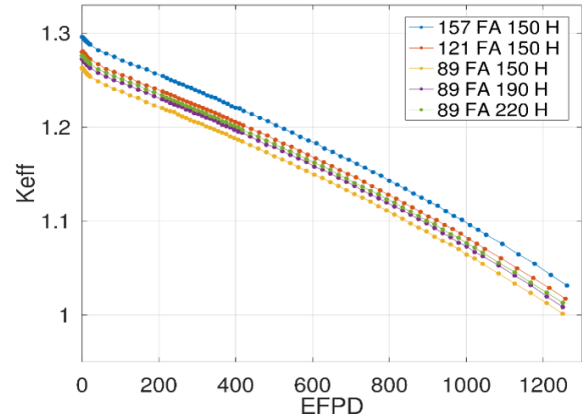


Figure 3. K_{eff} vs. EFPD for different cases under analysis.

Fig. 3 shows that increasing the height of the reactor core slightly increases the value of initial reactivity, and the fuel cycle length, the same behavior is enhanced when the radius of the core is increased. The increment of the number of FA produces a larger increase in the fuel cycle length than the increase of the core height.

In Fig. 4 it is observed an increase of 150 EFPD in the fuel cycle length for the case of 157 FA and 220 cm of height compared with the reference case. Furthermore, it was obtained an increase of 40 MWth in the thermal power, representing 59 750 MWd of the energy produced.

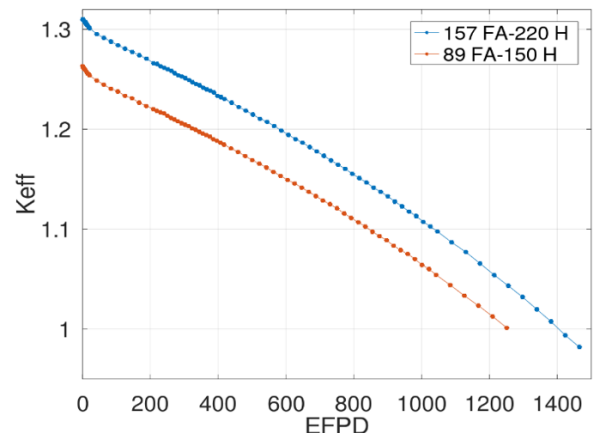
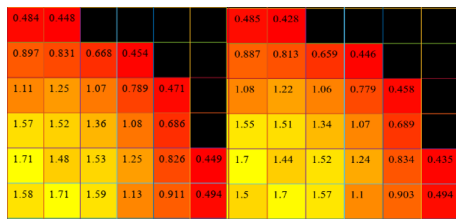


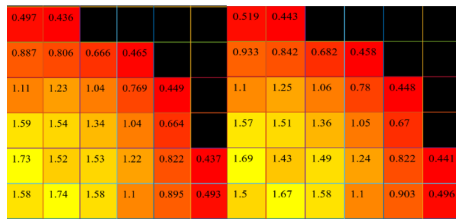
Figure 4. K_{eff} vs. EFPD for 157 FA and 220 cm core height and reference case.

To analyze the released power distributions during the fuel cycles, Fig. 5 shows the radial peak factors distributions for the beginning and end of life states (BOL and EOL), for the analyzed cases. A symmetry of a quarter of the core was considered.

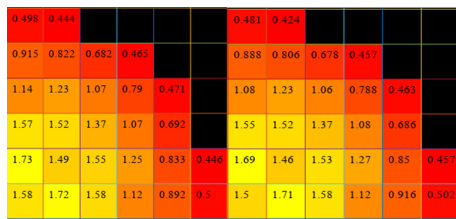
In all cases, there is a slight decrease in the maximum value of the peak factor between the beginning and the end of the fuel cycle. When the number of FA is increased, a greater non-uniformity in the radial distribution of the energy released is observed, which is consistent since all the FA have the same enrichment. Increasing the height of the core has little influence on the radial power distribution.



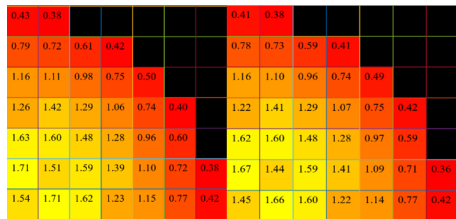
a) 89 FA 150 H BOC 89 FA 150 H EOC



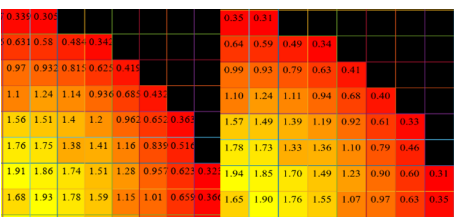
b) 89 FA 190 H BOC 89 FA 190 H EOC



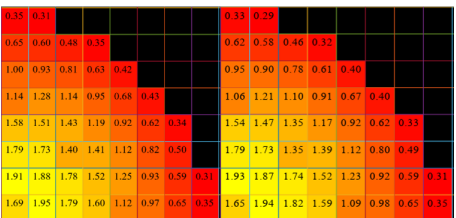
c) 89 FA 220 H BOC 89 FA 220 H EOC



d) 121 FA 150 H BOC 121 FA 150 H EOC



e) 157 FA 150 H BOC 157 FA 150 H EOC



f) 157 FA 220 H BOC 157 FA 220 H EOC

Figure 5. Radial power peak factors distributions for the analyzed cases.

IV. CONCLUSIONS

In this work, the neutronic behavior of a SMR of 25MWt PWR-type with TRISO fuel was studied with different

configurations with the goal of increasing the core thermal power.

Several core design possibilities were analyzed, including the increase of the core height, the increase of the number of FAs keeping the standard height, and increasing the core height and radius. For the computational simulation of the fuel cycles, an increase in power proportional to the core volume was considered. Increasing the core axial dimensions does not considerably increase the thermal power or the fuel cycle length in relation to the reference case.

Increasing the core radius by incrementing the number of FA increases the length of the fuel cycle and the energy produced, however, it produces a greater non-uniformity in the radial power distribution.

An analysis using two fuel compositions for the central and peripheral zones of the reactor core, that guarantee an approximate length of 1400 EFPD should be carried out, in order to flatten out the radial power distribution for the axial and radial elongated cases.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the "Universidad Nacional Autónoma de México" for the postdoctoral fellowships of Jesús Rosales, and for the support through the research project: Nuclear reactors and nuclear fuel cycles, and for facilitating the use of the MIZTLI supercomputer under the LANCAD-UNAM-DGTIC-253 project.

REFERENCES

- [1] J. Rosales, J. L. François, A. Ortiz, C. García, Nucl. Eng. Des. **387**, 111599 (2022).
- [2] A. Hussain and C. Xinrong, Prog. Nucl. Energy **52**, 31 (2010).
- [3] M.-H. Kim, K.-M. Bae and Y.-J. Kim, Trans. Am. Nucl. Soc. **77**, 396 (1997).
- [4] J. Rosales et al., Int. Conf. Phys. React., 2092 (2022).
- [5] A. Khan, A. Hussain, H. Rehman and M. Ahmad, Prog. Nucl. Energy **75**, 10 (2014).
- [6] J. Leppänen, M. Pusa, T. Viitanen, V. Valtavirta and T. Kaltiaisenaho, Ann. Nucl. Energy **82**, 142 (2015).
- [7] F. Brown, W. Martin, J. Leppanen, W. Haeck and B. Cochet, Physor-2010 **836**, 1 (2010).
- [8] J. Leppänen, Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code, VTT Technical Research. Centre of Finland, (2019). <http://serpent.vtt.fi/mediawiki/index.php/Main> (accessed Jun. 03, 2019).



FAST DETECTION OF PROSTATE MALIGNANT TISSUE BY MULTIPULSED LAER-INDUCED BREAKDOWN SPECTROSCOPY (LIBS)

DETECCIÓN RÁPIDA DE TEJIDO MALOGNO EN LA PRÓSTATA EMPLEANDO LA TÉCNICA DE RUPTURA INDICIDA POR LÁSER ILIBS) EN RÉGIMEN MULTIPULSO

A. PONCE^a, T. FLORES^{a†} AND L. PONCE^{a,b}

a) Onteko LLC, 9924 Alexanders Ridge Dr., Olive Branch, MS 38654, USA

b) Saint Petersburg Electrotechnical University, Professora Popova St 5, 197376 St.Petersburg, Russia; manjuary@gmail.com[†]

[†] corresponding author

Recibido 18/1/2022; Aceptado 12/11/2022

We evaluate the use of laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) coupled with chemometric methods as a fast and simple technique for identifying diseased tissue in prostate cancer samples. The experimental setup consisted of a neodymium-doped yttrium aluminum garnet (Nd:YAG) laser in a burst-mode regime, with differing time delays for the spectrometer readings. To improve classification accuracy, principal component analysis (PCA) was coupled with neural analysis (NA), achieving a high identification accuracy of 97 %. It can be concluded that LIBS has the potential to serve as a technique for the detection and diagnosis of human prostate cancer.

Evaluamos el uso de la espectroscopía de ruptura inducida por láser (LIBS) acoplada con métodos quimiométricos como una técnica rápida y sencilla para identificar tejido enfermo en muestras de cáncer de próstata. El dispositivo experimental consistió en un láser de granate ytrio-aluminio dopado con neodimio (Nd:YAG) en modo de pulsos, con diferentes retardos temporales para las lecturas espectrométricas. Para mejorar la calidad de la clasificación, se acopló el análisis de componente principal (PCA) con análisis neural (NA), lográndose una gran precisión de identificación, del 97 %. Se concluye que el LIBS posee el potencial de servir como técnica para la detección y diagnóstico de cáncer de próstata humano.

PACS: Laser (láser), 42.55.-f; Spectroscopy (espectroscopía), 42.62.Fi; Laser-produced plasma (plasma producido por láser), 52.50.Jm; Cancer (cáncer), 87.19.xj.

I. INTRODUCTION

Early detection is one of the most important factors determining cancer survival rates, but it remains a challenge, even after extensive and continuous efforts. In many cases, diagnosis depends on the subjective analysis of a biopsy sample. Other commonly used techniques, such as computer tomography and magnetic resonance imaging, are expensive, time-consuming, and do not provide detailed information about the boundaries between the tumor and the normal tissue surrounding it, which is essential to minimize the trauma induced during surgical operation. Thus, the development of fast and reliable detection methods could considerably improve clinical outcomes.

Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) is a technique that meets all the requirements mentioned in the previous paragraph [1]. It has a growing impact on and popularity in compositional analysis because of its portability, high speed, low cost, capability to perform close to immediate identification, and the fact that it does not require chemicals [2]. The technique involves short laser pulses capable of ablating a small amount of material, thereby creating plasma momentarily. An optical fiber collects a portion of the light emitted from the plasma and delivers it to a spectrometer. The captured spectra constitute a “fingerprint” associated with a sample’s elemental composition.

Since the first published report on the use of LIBS for the detection of cancerous tissue in 2004 [3], several research groups have developed different novel approaches for this potential application. These include the LIBS-based immunoassay (Tag-LIBS) [4], direct analysis of samples through the combined use of LIBS and machine learning algorithms [5], and the use of frozen samples or in-vacuum detection [6].

In this work, we introduce a different experimental approach for the LIBS technique that involves using a laser with a controllable sequence of pulses to reduce the signal-to-noise ratio, thus improving detection, coupled with principal component analysis (PCA) and neural networks.

II. MATERIALS AND METHODS

Normal tissue and cancer samples were obtained from the US Biolab Biorepository (Washington, D.C., United States). The samples were prostate tissue microarrays (TMA) containing cores with pathologically diagnosed adenocarcinoma and the corresponding normal prostate tissue.

As shown in Fig. 1, each core was approximately 1.5 mm in diameter and 2-5 μm in thickness. In each array, 16 adenocarcinoma cores and 10 normal prostate tissue cores

were fixed with formalin on a microscope slide.

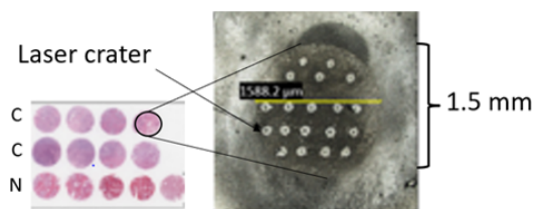


Figure 1. An illustration of the tissue microarray. C, Cancer samples; N, healthy reference samples. Right panel: the magnified image of one sample after being irradiated by several laser pulses.

III. LIBS EXPERIMENTAL SETUP

For the analysis, we used the “SLIT-LIBS” instrument supplied by Onteko LLC (Olive Branch, Mississippi, United States), which includes a laser that emits in a burst mode regime, as described below. In this device, the laser beam was coupled with the optical path of a slit-lamp microscope for better visualization of the samples.

A schematic representation of this setup is shown in Fig. 2. The pulsed (neodymium-doped yttrium aluminum garnet) Nd:YAG laser emits at a wavelength of 1,064 nm while working in a Q-switch regime, producing light pulses (shots) with an energy of up to 40 mJ at a frequency of 1 Hz. A low-power red laser was used to point where the Nd:YAG laser would irradiate, ablate the sample, and generate the plasma.

Each laser shot consisted of a train of up to three micro-pulses, each having a duration of 8 ns and an interval around 25 μ s between each pulse, resulting in an overall shot duration of about 70-80 μ s for the three-pulse train. The 2 mm in diameter laser beam was focalized using a 50 mm focal length lens, which produced a 44 μ m spot diameter at the focal point. The laser ablation process induced the emission of light, which was collected by an optical fiber and delivered to a cross-Czerny-Turner spectrometer with a linear charged-coupled device (CCD) as a detector. The spectral resolution of the system was 0.3 nm, with a spectral range of 250-800 nm. The total reading time of the spectrometer was approximately 3.8 ms.

The use of a train of laser pulses instead of the typical single-pulse regime to improve the signal-to-noise ratio in LIBS has been reported in previous work [2]. The multi-pulse can be achieved in two ways:

A) If there is enough temporal separation between each laser pulse to avoid over-lapping with the plasma generated by the previous pulse, then the detected emission will be the sum of the plasma generated by the three pulses. To accomplish this result, the pulses must be separated by several dozen microseconds.

B) If the separation between pulses is just a few microseconds long, each new pulse will be partially absorbed by the plasma generated by the previous one. In this case, it is possible to re-excite the plasma, leading to a higher intensity of the

spectral peaks and improved detection.

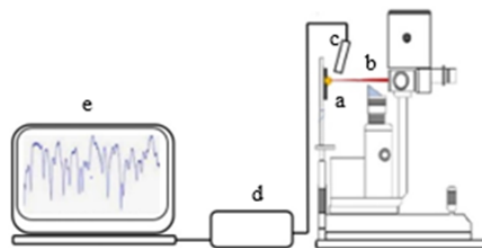


Figure 2. A schematic of the experimental setup: a) sample, b) laser beam, c) detector, d) spectrometer, e) computer.

IV. EXPERIMENT DESCRIPTION

For the spectra collection, a tissue microarray slide was placed over a platform located directly in front of the laser emission source. Our instrument allowed visual observation of the sample through a microscope with a magnification of up to 40X and collimation of the laser over the desired spot on the sample using a micrometric xyz stage.

This setup allowed us to perform the spectral measurements from several spots in each tissue core.

Once each core ran out of fresh available surface, we moved on to the next. Fig. 3A shows a representative example of a crater created as a result of the laser pulse. The crater shown has a diameter of 154 μ m and depth of 2.34 μ m. The image and crater profile were obtained with a Lext OLS5000 confocal microscope from Olympus (Waltham, Massachusetts, USA). The central part of the Gaussian beam also slightly ablated the glass substrate in the center of the crater, as shown in the 3D image in Fig. 3B.

To calculate the total mass extracted by the pulse, the geometry of the crater was approximated as a cylinder with a diameter of 150 μ m and a depth of 2.3 μ m. Then, for a prostate tissue density of 0.98 g/mL [7], the ablated mass will be less than 41 ng per crater.

Assuming that a LIBS device is used as an alternative to a traditional prostate biopsy analyzing 10 different areas and taking 50 spectra in each area, the total extracted tissue would amount to around 0.02 mg. This is considerably less than a traditional biopsy, which typically requires close to 200 mg of tissue [8]. This represents an important advantage when considering LIBS as a potential technique for cancer biopsies.

In Fig. 3B, the orange lines show between which points it is measured, while the dotted blue lines indicate the measured values. For example, the blue dotted line above indicates 154 μ m for the diameter of the crater. The vertical dotted blue line located on the left indicates the depth of most of the crater base, which is 2.34 μ m. Finally, the blue dotted line on the far

right indicates the maximum depth of the crater of 4 μm .

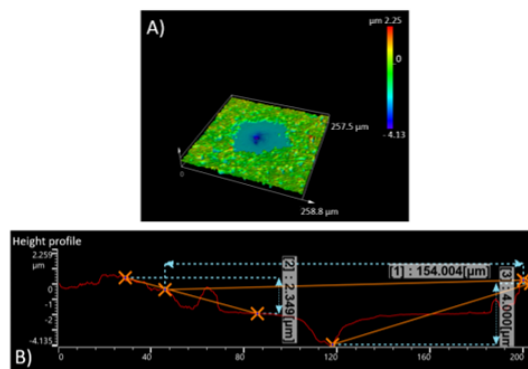


Figure 3. A) A representative 3D image of the laser crater. B) The depth profile of the laser crater.

Each laser pulse generates plasma, and its emitted light is captured through an optic fiber, which delivers it into a USB400 spectrometer. In total, 400 spectra were captured, with 100 spectra for cancer tissue and 100 for normal tissue repeated at 2 μs and 10 μs delays where the delay refers to the start of the spectrometer reading with respect to the laser pulse. The spectra shown in Fig. 4 (top panel) are the averages of each group.

V. RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 4 (top panel) shows the spectra of healthy and cancer tissue samples captured with a 2 μs delay, as well as the spectra resulting from the subtraction between the two. With this delay setting, significant electronic background noise can be observed. This came from the first two micropulses and is contributing to the differentiation between normal and cancer samples, possibly due to the differences in absorption of the laser radiation between the plasma produced by healthy and cancer tissue. Additionally, several elemental peaks contributed to the difference, most notably Fe, Ca, and Na.

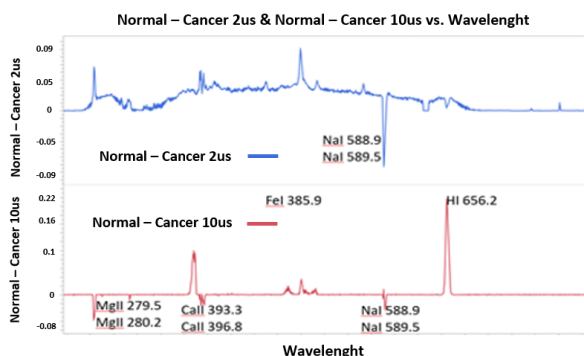


Figure 4. Top panel: LIBS spectral for the difference spectra (blue) with a time delay of 2 μs . Bottom panel: LIBS spectra for the difference spectra (red) with a time delay of 10 μs .

The spectra captured using a time delay of 10 μs (Fig. 4, bottom panel) show characteristic lines that correspond to plasma species whose lifetime must be longer than 10 μs . For this case, we had no bremsstrahlung, as the spectrometer

started recording after the electronic background for the last pulse had faded. In the difference spectra, several lines were not distinguishable with a delay of 2 μs , probably because some of the less intense lines were masked by the electronic background.

As with the 2 μs spectra, the difference spectrum for the 10 μs time delay was obtained by subtracting the averages of the normal and cancer spectra. It permitted us to intuitively visualize which elements contributed to the differences between the two groups.

A significant contribution to the ability to distinguish between healthy and cancerous samples is Ca, whose doublet was observed at 393.37 and 396.85 nm. The intensity of the Ca peaks was stronger in the cancer samples.

Another strong contribution to differentiation was provided by Na, whose peaks were observed at 589.0 nm and 589.6 nm. Their intensities were weaker for the normal samples.

To explore the differences in the relative intensity between elements in normal tissue and cancer samples, each spectrum's intensity was normalized by its highest value.

As observed in Fig. 4, the differences between the groups were difficult to determine solely on the visual examination of the spectra. Thus, chemometric methods were used to classify the spectra. Principal component analysis (PCA) is an unsupervised algorithm that has been successfully used to analyze LIBS data [9]; it aims at combining and replacing the original variables with a new, smaller set of features (principal components) while losing as little information as possible. PCA is commonly used to reduce the dimensions of the data.

This is especially useful with LIBS data, as each spectrum is composed of thousands of intensity values. The PCA results can be displayed using the scores, which are values describing the variation in the samples for each principal component. The scores for the two principal components that express most of the variation in the data set are used for a scatter plot, which gives a visual indication of whether the samples separate into distinguishable clusters.

The PCA score plots for the data sets with 10 μs and 2 μs delays are shown in Fig. 5. Although the samples tended to group together, the data points for cancerous and normal tissue did not separate into clearly discrete clusters and did not permit clear visual discrimination; therefore, further analysis was necessary to classify the samples.

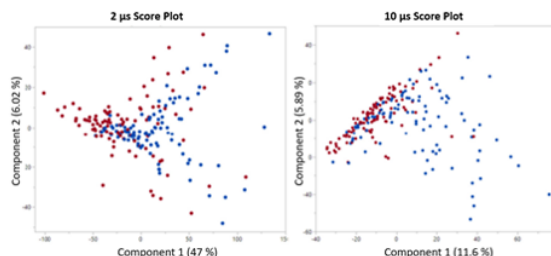


Figure 5. Principal component analysis score plots for time delays of 2 μs (left panel) and 10 μs (right panel).

Neural networks have been used successfully as a classification method for LIBS data in the past [10, 11]. In

this case, a single-layer perceptron with three hidden nodes was used, with the first 20 principal components from the PC analysis as inputs. For validation purposes, a five-fold methodology was used. This partitioned the dataset into five equal sets and used one for validation, while the other four were used to train the model. This procedure was repeated for each of the five folds, and the model that resulted in the best classification statistics was selected. JMP version 15 (SAS Institute Inc. Cary, North Carolina, USA) was used to perform all statistical analyses.

Table 1. Performance of the neural analysis model applied to the sets of LIBS data with 2 μ s and 10 μ s delay. (RMSE: Root Mean Square Error)

Training set			
2 μ m delay		10 μ m delay	
R ²	0.936	R ²	0.260
RMSE	0.141	RMSE	0.445
Misclassification Rate	0.018	Misclassification Rate	0.268
Validation set			
2 μ m delay		10 μ m delay	
R ²	0.971	R ²	0.478
RMSE	0.099	RMSE	0.387
Misclassification Rate	0.025	Misclassification Rate	0.190

Some of the measures of fitness for the neural network models are shown in Table 1. R² is a correlation coefficient that compares the fitness of the model to that of a constant model, with a value of 1 for a perfect model. The R² of 0.97 achieved with a 2 μ s delay indicates a good correlation between the predicted values calculated by the model and the LIBS data and is considerably higher than the 0.47 obtained with a 10 μ s delay. The neural network model using a shorter delay also shows a smaller root mean squared error (RMSE), which translates into an overall lower misclassification rate.

VI. CONCLUSIONS

Detection using LIBS spectra with a time delay of 10 μ s allowed obtaining clean spectra with minimal electronic background, similar to those reported in the literature.

Neural network analysis had a prediction rate of 0.732. Using a time delay of 2 μ s resulted in spectra containing visible electronic background, which is usually undesirable for spectral analysis. Nonetheless, in this case, the electronic

background seemed to offer an unexpected benefit for the neural network's classification accuracy, resulting in a prediction rate of 0.975. These results require further inquiry to unfold the underlying mechanisms, but if confirmed, they could provide a useful approach when using LIBS for the classification of complex biological samples.

All in all, we can say that LIBS, coupled with chemometric and machine learning methods, has the potential to be developed into a minimally invasive technique for prostate cancer detection thanks to the negligible sample size required, the immediacy of the analysis, and the relatively low cost of the required equipment.

REFERENCES

- [1] D. Santos Jr, L. C. Nunes, G. G. A. de Carvalho, M. da Silva Gomes, P. F. de Souza, F. de Oliveira Leme, L. G. C. dos Santos and F. J. Krug, *Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc.* **71**, 3 (2012).
- [2] F. Alvira, T. F. Reyes, L. P. Cabrera, L. M. Osorio, Z. P. Baez and G. V. Bautista, *Appl. Optics* **54**, 4453 (2015).
- [3] A. Kumar, F. Y. Yueh, J. P. Singh and S. Burgess, *Appl. Optics* **43**, 5399 (2004).
- [4] N. Noureddine, Y. Markushin, D. C. Conolly, J. Lasue, E. Ewusi-Annan and S. Makrogiannis, *Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc.* **123**, 33 (2016).
- [5] J. Guezenc, A. Gallet-Budynek and B. Bousquet, *Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc.* **160**, 105688 (2019).
- [6] R. Gaudiuso, E. Ewusi-Annan, W. Xia and N. Melikechi, *Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc.* **171**, 105931 (2020).
- [7] R. Arora, R., M. O. Koch, J. N. Eble, T. M. Ulbright, L. Li and L. Cheng, *Cancer* **100**, 2362 (2004).
- [8] M. A. Bjurlin and S. S. Taneja, *Curr. Opin. Urol.* **24**, 155 (2014).
- [9] J. Wang, L. Li, P. Yang, Y. Chen, Y. Zhu, M. Tong, Z. Hao and X. Li, *Lasers Med. Sci.* **33**, 1381 (2018).
- [10] S. Moncayo, S. Manzoor, T. Ugidos, F. Navarro-Villoslada and J. O. Caceres, *Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc.* **101**, 21 (2014).
- [11] S. Manzoor, S. Moncayo, F. Navarro-Villoslada, J. A. Ayala, R. Izquierdo-Hornillos, F. J. M. de Villena and J. O. Caceres, *Talanta* **121**, 65 (2014).

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.



CLAYFF FORCE FIELD VERSUS TIP3P WATER MODEL IN MOLECULAR SIMULATIONS: VALIDATION FOR MONTMORILLONITE CLAY MODEL

CAMPO DE FUERZAS CLAYFF VERSUS MODELO DE AGUA TIP3P EN SIMULACIONES MOLECULARES: VALIDACIÓN PARA EL MODELO DE ARCILLA MONTMORILLONITA

A. LAM^{a†}, G. ROJAS-LORENZO^b

a) Zeolite Engineering Laboratory, Institute of Material Science and Technology (IMRE), University of Havana, Havana, CP. 10400, Cuba; anabel@imre.uh.cu[†]

b) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Universidad de La Habana, Ave. Salvador Allende y Luaces, Quinta de Los Molinos, Plaza, La Habana 10600, Cuba; german@instec.cu

[†] corresponding author

Recibido 12/10/2022; Aceptado 25/11/2022

Molecular simulations have been useful tools in the research of the host-guest interactions in clays. It has been possible due to the implementation of appropriate force fields to simulate clays, as the CLAYFF. It uses the SPC potential to reproduce the water interactions. However, this is a limitation when combined with the most commonly used organic force fields, AMBER and CHARMM, that use the TIP3P water potential. In the present paper, molecular dynamics simulations of the water-clay model system was done using a combination of CLAYFF with SPC and TIP3P water force fields in order to validate the use of TIP3P water model with the CLAYFF. The results shows very good agreement between radial distribution functions and diffusion coefficients using both water potentials combined with CLAYFF. This fact opens the possibility of using this clay force field with the CHARMM and AMBER force fields.

Las simulaciones moleculares han sido herramientas útiles en la investigación de las interacciones hospedero-huésped en arcillas. Esto ha sido posible gracias a la implementación de campos de fuerza apropiados para simular arcillas, como el CLAYFF. En el mismo, las interacciones de las moléculas de agua son modeladas usando el potencial SPC. Sin embargo, esta es una limitación para combinar con los campos de fuerza orgánicos más utilizados, AMBER y CHARMM, que utilizan el potencial TIP3P del agua. En el presente trabajo realizamos simulaciones de Dinámica Molecular en un sistema arcilla-agua utilizando los potenciales CLAYFF-SPC y CLAYFF-TIP3P en aras de validar el uso de esta última combinación de potenciales. Los resultados muestran una muy buena concordancia entre las funciones de distribución radial y los coeficientes de difusión utilizando ambos potenciales del agua combinados con CLAYFF. Este hecho abre la posibilidad de utilizar este campo de fuerza de arcilla con los campos de fuerza CHARMM y AMBER.

PACS: Molecular dynamics calculations (cálculos de dinámica molecular), 31.15.xv; Solvent effects (efectos solventes), 31.70.Dk; Potential energy surfaces (superficies de energía potencial), 31.50.Bc.

I. INTRODUCTION

Clays and clay minerals are materials with many applications in agriculture, construction, the pharmaceutical and cosmetic industries, oil refining, and many chemical processes. They were widely studied in the 20 century, while their research in the XXI century is focusing on their connection with emergent fields, such as environmental remediation and biopharmaceutical applications [1,2].

In the last two decades, theoretical methods have been useful and essential tools in the research of the host-guest interactions in clays. Important advances in the simulation of different processes in these materials have been achieved. Quantum and classical calculations have allowed to deepen our understanding of the interactions between clays and different guest molecules [3,4]. It has been possible due to the implementation of appropriate force fields (FFs) to simulate clays using Molecular Dynamics (MD) and other classical simulations.

Force Fields with quality and transferability, are essential

for MD. The FFs are mathematical functions that have been adjusted to certain conditions (temperatures, composition, pressure, etc.) for some compounds. And in many cases, they are used on other materials and in a wide range of conditions. That is why the selection of the appropriate FFs is a challenge for computational materials science. A more in-depth discussion of this topic can be found in reference [5].

CLAYFF has been one of the most used force fields to model clay structures [6]. It uses the SPC potential [7] to reproduce water interactions. However, it poses limitations when combined with the most used organic force fields, AMBER [8] and CHARMM [9], which use the TIP3P potential [10] to model water molecules. Choosing appropriate force fields combinations to simulate inorganic-organic interactions is essential in order to understand the molecular mechanisms present in the drug-clay or protein-clay interactions. For example, Wright & Walsh tested the transferability of TIP3P to CLAYFF for quartz [11]. They did not observe any difference between the radial distribution function (rdf) Si-Ow between both water potentials. Recently, we reported MD simulations of ciprofloxacin and montmorillonite clay

models interactions using CLAYFF and Universal Force Field potential (UFF) [12]. However, the possibility to combine CLAYFF with the most used force field for drugs and proteins, CHARMM and AMBER, starts with the correct validation of the use of TIP3P water model with the CLAYFF. In the present paper, MD simulations of the lithium fluorhectorite clay model with water were done using a combination of the CLAYFF model and SPC and TIP3P water force fields. The aim is to validate the use of the TIP3P water potential with the CLAYFF force field for clays. This will open the possibility to combine both force fields to simulate the interactions of clays with drugs, proteins and others organic molecules.

II. METHODOLOGY

The clay model used is a supercell of 5x5x3 unit cell of Lithium fluorhectorite that contains 900 water molecules in the interlayer spaces and was built as described in ref. [12]. Also the periodicity in the 010 direction was cleaved and a slab of 30 Å with 1493 water molecules ($\rho \sim 0,95 \text{ g/cm}^3$) was inserted in the simulation box to reproduce the interaction of the clay model with the outer solution. The density of the outer water slab is very near to the liquid water and to the previously reported for other water simulations [13,14]. The valences of Si and O atoms of the surface were compensated adding OH and H, respectively, ending the tetrahedral clay edges with OH groups. Meanwhile, octahedral ions (Mg^{2+} , Li^+ and F^-) were not balanced.

CLAYFF was the potential used to describe the clay interaction [6]. The Morse potentials terms for OH clay edge surfaces proposed by Pouvreau et al [15] was used instead the ones used in reference [12]. However, the angle term and water potential suggested by Prouveau was not possible to adapt to our model. When they were used, the simulation results evolved to water cluster formation and the separation of the H in the OH terminal group. The parameters of Li^+ compensating cation were taken from Koneshan et. al. [16].

In order to compare the two water potentials, SPC [7] and TIP3P [10], were used to simulate the water interactions.

The intermolecular interactions, i.e., the van der Waals and electrostatic forces between the atoms of the clay and water molecules, have been treated with the parameters proposed by the different force fields. More details about Lennard Jones potential and the combination rules used to determine its parameters, and the potentials, parameters and atomic charges used in the simulations are discussed and presented in our Supporting Information.

MD simulations were performed with the DL_POLY software [17]. Different simulations steps were done to equilibrate the system. Firstly, the clay framework and water were fixed and only the clay terminal OH was relaxing during 1 ps at 300 K in the NVE simulation with a time step 10^{-16} s. Second, the water and the OH terminal were relaxed, keeping fixed the clay framework, in the NVT simulation of 2 ps at 300 K with time step of 5×10^{-16} s. After that, in the third step, all atoms were relaxed, except those Li and F of the octahedral sheets that are in the cleaved surface in contact with the water

solution. These ions were fixed during the simulations in order to avoid possible diffusion. A NPT simulation of 100 ps at 300 K, 1 atm and time step 1 fs was done. Once the system was perfectly equilibrated, a production run of 1 ns in the NPT system with the same details of the third step was performed. The Nosé-Hoover thermostat and barostat were used, each with a 100 fs relaxation time, respectively. In all simulations, periodic boundary conditions were applied, with a time step of 1 fs. The Ewald summation method was used to calculate the electrostatic interactions of the system. The cutoff of the long range interactions, the Coulomb and the Lennard-Jones potentials, were set to 10 Å. The trajectory of the atoms in the NPT simulations was collected each 5000 steps for dynamics and structural analysis.

III. RESULTS

Fig. 1 shows the evolution of Volume (V), Temperature (T) and Total Configurational Energy (E) during the simulation for the two modeled systems.

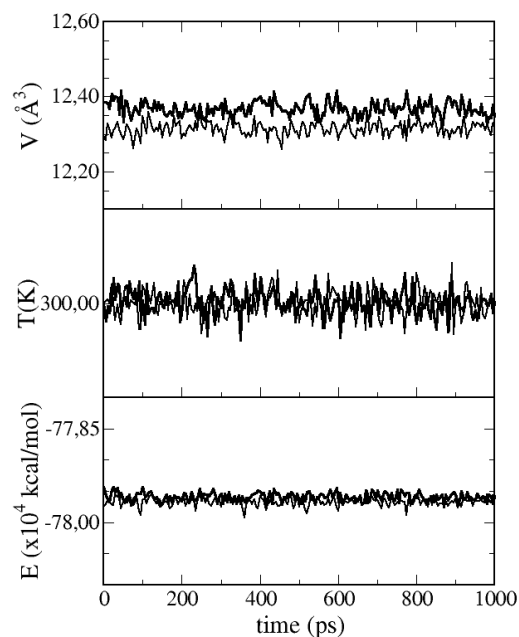


Figure 1. Volume, Temperature and Total Configurational Energy values recorded each 5000 steps during the simulation. The thickest line is the CLAYFF-SPC water system, while the thinnest line is the CLAYFF-TIP3P water system.

As can be seen, the three properties are controlled during the 1ns of simulation. The graphics also show good agreement between the results of the SPC and TIP3P water potential simulations. The Average values (Av) and the standard deviation (s) of the V, T and E can be found in Table SI2 from Supporting information. It is important to remark that the standard deviation of T only represents the 0.92 % of the Av , instead for the V and E, which are 0.16 and 0.01 %, respectively. These results support the fact that the simulated systems are well equilibrated.

The property used to compare the results of the simulation of the clay-SPC water and clay-TIP3P water systems was the

radial distribution function (rdf) of the principal clay atoms (Si, O, Li⁺) and the oxygens of the water (OW). They are shown in Fig. 2. As can be seen, there is very good agreement in the position and the amplitude of the different peaks for both modeled systems. This fact supports the possibility of combining the TIP3P water potential with the CLAYFF force field to simulate similar clay models, opening the possibility to combine CLAYFF with the CHARMM and the AMBER force field using TIP3P water.

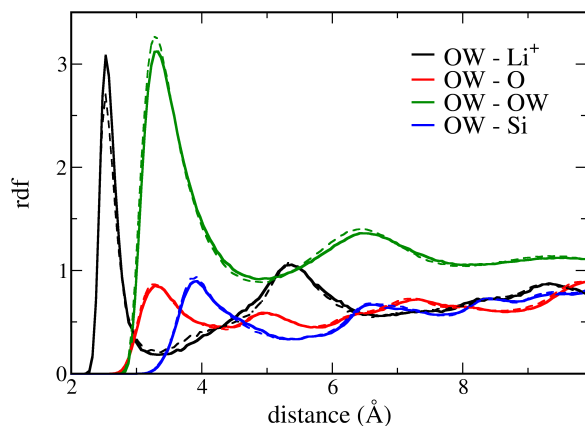


Figure 2. Radial distribution function of the OW-Li⁺, OW-O, OW-OW and OW-Si pairs. The continuous lines are from the CLAYFF-SPC water system, while the dashed lines belong to the CLAYFF-TIP3P water system.

Important information can be determined by analyzing the radial distribution function. The first peak of the Li⁺-OW rdf begins at 2.29 Å, has a maximum between 2.52 and 2.53 Å, and decays around 3.1 Å, indicating the average distance of the first hydration sphere of the compensating cation in these kind of systems.

The OW-OW rdfs reported for liquid water simulations with SPC and TIP3P have the first peaks at 2.78 and 2.77 Å, respectively [18]. In the present simulation the first OW-OW rdf peaks can be found at bigger distances (3.31 and 3.28 Å, respectively) and it could correspond to the number of water molecules that are occluded inside the clay interlayer. At the beginning of the simulations there were 900 water molecules in the interlayers and 1493 in the outer solution. These framework water molecules have space limitations to interact between them, due to the confinement effect inside the clay. And they are also interacting with the Li⁺, favoring the formation of the hydration sphere, which affects the molecule arrangement of the liquid water. These facts can be the cause of the displacement of the OW-OW first peak of the rdf.

The OW-Si and OW-O radial distribution functions indicate the distance between water molecules and the framework atoms. The SPC and TIP3P potentials locate the water molecules at the same distance of the clay atom (3.30 and 3.92 Å, respectively), indicating that both can reproduce appropriately these interactions.

Now we discuss the Diffusion coefficients (D). Table 1 shows the most outstanding D coefficients of the different atoms. As

expected, the clay framework atoms have D values four orders of magnitude smaller than those in water atoms and the Li⁺ compensating cations have diffusion coefficient three orders of magnitude smaller than those of water. They are the clay species with largest motion during the simulation, according to the fact that compensating cations and water molecules have freedom of motion in these materials. It was possible to observe during the simulation the interlayer movement of some Li⁺ cations using both types of water parameters.

The D value obtained for OW and HW (see Table 1) are of the same order of those reported for liquid water modeled with SPC and TIP3P. It is important to note that the D values calculated for SPC-clay are in good agreement with the D values of liquid SPC water and very similar to those of TIP3P water [18]. Moreover, the D water values can be compared with those reported by González Sánchez et al. for water in fully hydrated (f.h.) Na⁺ and Ca²⁺ Montmorillonite (m) [19]. These are important facts that validate our simulations.

Finally, Infrared (IR) spectra were obtained from the Fourier transform of the velocity autocorrelation functions [20, 21] of the CLAYFF-SPC and the CLAYFF-TIP3P simulations. However, a complete interpretation of the spectra in clays is impossible because of the high number of atoms in the unit cell and its disorder, so a clear correlation between structure and vibrational data does not exist.

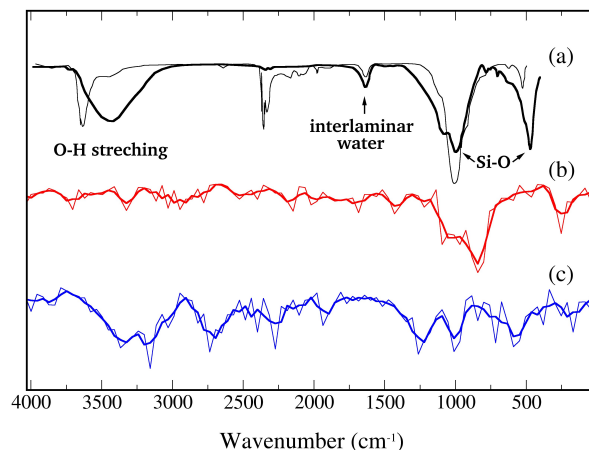


Figure 3. IR spectra. (a) Experimental FTIR: thinner and thicker lines correspond to dehydrated synthetic montmorillonite [22], and experimental FTIR obtained for lithium fluorohectorite with water [23], respectively. (b) CLAYFF-SPC (c) CLAYFF-TIP3P. In (b) and (c), thinner lines correspond to the Fourier transform of the velocity autocorrelation functions, and the thicker lines are the smoothed spectra, respectively.

Fig. 3 shows the simulated and experimental FTIR spectra [22, 23]. As can be seen in the experimental spectra, four important bands associated with the Si-O and H-O vibration normal modes are present. The anti-symmetric and symmetric stretching of Si-O can be observed at 1091 and 997 cm⁻¹. Also the out-of-plane Si-O bending band at 710 cm⁻¹ and the in-plane bending at 472 cm⁻¹ are also identified. These bands also appear in the simulated spectra, and are more defined in CLAYFF-SPC. However, the band at 1643 cm⁻¹, associated to the bending in the plane of the water molecules in the interlayer space (δ H₂O), are not observed in the simulations: This is because for the SPC and TIP3P potentials,

the water molecules are regarded as rigid particles and the O-H vibrations are not taken into account. The band at 3448 cm^{-1} associated to the stretching vibration O-H is reproduced in both simulated spectra, better defined in TIP3P, and it corresponds to the vibration of the OH groups of the clay edges.

Table 1. Diffusion coefficients of the atoms present in the simulated systems using SPC and TIP3P water models.

Atoms	D ($10^{-9}\text{m}^2\text{s}^{-1}$)	
	CLAYFF-SPC	CLAYFF-TIP3P
Si	3.4523×10^{-4}	4.2634×10^{-4}
Oo	3.443×10^{-4}	4.2210×10^{-4}
O	3.5463×10^{-4}	4.1261×10^{-4}
Mg	3.3943×10^{-4}	4.1586×10^{-4}
Li	2.8841×10^{-4}	3.7062×10^{-4}
F	2.9459×10^{-4}	3.3898×10^{-4}
Li ⁺	3.0641×10^{-3}	3.0262×10^{-3}
Oh	4.2045×10^{-4}	8.3572×10^{-4}
H	4.4879×10^{-4}	7.4912×10^{-4}
OW	4.0251	3.9112
HW	4.0255	3.9121
Liquid water [15]	4.22	5.67
Water [19]	2.37 ± 0.12	
Na-m (f.h.) [19]	1.21 ± 0.12	
Ca-m (f.h.) [19]	1.22 ± 0.08	

IV. CONCLUSIONS

The good agreement between the radial distribution functions of the water oxygens (OW) and the principal atoms of the clay and the OW-OW using both SPC and TIP3P water potentials with CLAYFF force field was demonstrated. The interaction between the oxygens of the framework water and Li^+ compensating cations produces a displacement of the OW-OW rdf first peak, suggesting an organization of the solvent molecule which is different from that observed in liquid water.

The calculated diffusion coefficients support the fact that the compensating cation and water molecules have freedom of motion inside the clay materials. They are the atoms with bigger values of D, specially the atoms of water molecules, in comparison with framework atoms, that exhibited lower D values. The D values calculated for the water atoms are in good agreement with the estimated for liquid water using the SPC and TIP3P force fields.

In the simulations it is possible to reproduce the normal Si-O and H-O vibration modes of the clay framework and the terminal OH groups. However, the vibration normal modes of the water molecules are not observed, due to the limitations of the water potentials.

The simulations carried out using CLAYFF in combination with SPC and TIP3P water models and the further comparison of the results validate the possibility of combining CLAYFF

with TIP3P water, opening the possibility of using this clay force field with CHARMM and AMBER force fields.

The supplementary information document is available online at the Rev. Cubana Fis. website and/or upon request to the authors. It includes details about Lennard Jones's potential and the combination rules used to determine its parameters, and the potentials, parameters and atomic charges used in the simulations; the average values (Av) and the standard deviation (s) of the V, T and E.

ACKNOWLEDGMENTS

A. L. and G. R-L. would like to thank Cuban National Programs PN211LH008-027 and PN223LH010-017 for financial support.

REFERENCES

- [1] B. Biswas, J. Labille and B. Prelot, Environ Sci Pollut Res **27**, 38381 (2020).
- [2] M. Hanif, F. Jabbar, S. Sharif, G. Abbas, A. Farooq and M. Aziz, Clay Miner. **51**, 469 (2016).
- [3] A. Seppälä, E. Puhakka and M. Olin, Clay Miner. **51**, 197 (2016).
- [4] J. Suter, R. Anderson, C. Greenwell and P. Coveney, J. Mater. Chem. **19**, 2482 (2009).
- [5] S. M. Rassoulinejad-Mousavi and Y. Zhang, Scientific REPORTS **8**, 2424 (2018).
- [6] R. T. Cygan, J.-J. Liang and A. G. Kalinichev, J. Phys. Chem. B **108**, 1255 (2004).
- [7] H. Berendsen, J. P. M. Postma, W. van Gunsteren and J. Hermans, Interaction models for water in relation to protein hydration. In Intermolecular Forces, (Pullman, B., Ed.; D. Reidel: Amsterdam, 1981) pp. 331.
- [8] J. Wang, R. M. Wolf, J. W. Caldwell, P. A. Kollman, D. A. Case, J. Comput. Chem. **25**, 1157 (2004).
- [9] K. Vanommeslaeghe, E. Hatcher, C. Acharya, S. Kundu, S. Zhong, J. Shim, E. Darian, O. Guvench, P. Lopes, I. Vorobyov, A. D. Mackerell Jr, J. Comput. Chem. **31**, 671 (2010).
- [10] W. L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J. D. Madura, R. W. Impey and M. L. Klein, J. Chem. Phys. **79**, 926 (1983).
- [11] L. B. Wright and T. R. Walsh, J. Chem. Phys. **137**, 224702 (2012).
- [12] A. Lam, G. Rojas-Lorenzo, A. M. Ferrari, A. Rivera, C. M. Zicovich-Wilson and L. J. Alvarez, Rev. Cubana Fis. **37**, 34 (2020).
- [13] D. van der Spoel, P. J. van Maaren and H. J. C. Berendsen, J. Chem. Phys. **108**, 10220, (1998).
- [14] T. R. Underwood and H. C. Greenwell, Sci. Rep. **8**, 352 (2018).
- [15] M. Pouvreau, J. A. Greathouse, R. T. Cygan and A. G. Kalinichev, J. Phys. Chem. C **123**, 11628 (2019).
- [16] S. Koneshan, J. C. Rasaiah, R. M. Lynden-Bell and S. H. Lee, J. Phys. Chem. B **102**, 4193 (1998).
- [17] I. Todorov, W. Smith, K. Trachenko and M. Dove, J. Mater. Chem. **16**, 1911 (2006).
- [18] P. Mark and L. Nilsson, J. Phys. Chem. A **105**, 9954 (2001).

- [19] F. González-Sánchez, F. Jurányi, T. Gimmi, L. Van Loon, T. Unruh and L. W. Diamond, *J. Chem. Phys.* **129**, 174706 (2008).
- [20] P. Bornhauser and D. Bougeard, *J. Phys. Chem. B* **105**, 36 (2001).
- [21] M. Praprotnik and D. Janežič, *J. Chem. Phys.* **122**, 174103 (2005).
- [22] M. Lainé, E. Balan, T. Allard, E. Paineau, P. Jeunesse, M. Mostafavi, J.-L. Robert and S. Le Caër, *RSC Adv.* **7**, 526 (2017).
- [23] D. Hernández, L. Lazo, L. Valdés, L.C. de Ménorval, Z. Rozynek and A. Rivera, *Appl. Clay Sci.* **161**, 395 (2018).

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.



DAMAGE SPREADING AND INFORMATION DISTANCE IN CELLULAR AUTOMATA

PROGRAMACIÓN DE DAÑOS Y DISTANCIA INFORMACIONAL EN AUTÓMATAS CELULARES

K. GARCÍA-MEDINA^a, D. ESTEVEZ-MOYA^a Y E. ESTEVEZ-RAMS^{a,b†}

a) Physics Faculty, University of Havana, San Lázaro y L. CP 10400, Havana, Cuba.

b) Instituto de Ciencias y Tecnología de Materiales (IMRE), University of Havana, Havana, Cuba; estevez@fisica.uh.cu[†]

† corresponding author

Recibido 18/1/2022; Aceptado 12/11/2022

Using the concept of information distance derived from Kolmogorov randomness, we study damage spreading for elementary cellular automata acting on a one-dimensional lattice. In contrast to previous definitions of the Lyapunov exponent based on Hamming distance, the new magnitude allows a better clustering of chaotic rules. The combined use of the Lyapunov exponent, Hamming, and information distance-based, results in a more robust characterization of cellular automata behavior. An extension of the type analysis shown can be directly made to other one-dimensional time and space discrete dynamical systems.

La propagación de daños en autómatas celulares es estudiada utilizando distancia informacional, una magnitud derivada del uso de la complejidad algorítmica. Los autómatas celulares estudiados son los llamados elementales actuando sobre un arreglo unidimensional de sitios. Se define un exponente de Lyapunov derivado de la distancia algorítmica y se compara con definiciones más tradicionales del mismo. Una caracterización más robusta de los autómatas es lograda a partir del uso combinado de exponentes de Lyapunov, distancia de Hamming y distancia informacional. El método expuesto, queda claro, es extensible a otros sistemas dinámicos que sean discretos en el espacio y en el tiempo.

PACS: Information theory (teoría de la información), 89.70.-a; Entropy in information theory (entropía en teoría de la información), 89.70.Cf; Dynamical systems (sistemas dinámicos), 05.45.-a.

I. INTRODUCTION

Lyapunov exponents usually characterize sensitivity to initial conditions in dynamical systems, but in a discrete space system, it is not directly applicable [1]. By taking two (infinitesimal) close initial conditions, the maximum Lyapunov exponent can be loosely defined as the rate of exponential divergence of the distance between two trajectories in the limit of infinite time [2]. In a discrete space system, there is no infinitesimal close initial condition. Nevertheless, how two initially close configurations diverge when submitted to the same evolution dynamics is still an important measure, and ways to define and extend Lyapunov exponent analysis to discrete systems have been proposed [1,3,4].

In a discrete spatial system, initial conditions are said to be closed when the distance between two configurations is that given by the smaller possible change between them, complying with the discrete spatial nature. The need to define a distance measure is therefore needed. The simplest one, usually taken, is the Hamming distance between the configurations, or the number of cells where the two configurations differ. In such a case, the minimum distance is effectively one or the equivalent normalized value. As both systems evolve, damage spreading is quantified by the same Hamming measure [1]. Several behaviors can be observed:

1. The initial perturbation may disappear, and the two configurations, after some finite number of steps, are the same and, therefore, evolve in the same manner. In

the limit, the Hamming distance is zero.

2. The initial perturbation, beyond a certain finite number of time steps, does not grow anymore, although it can have a trajectory of its own: the Hamming distance is constant after a finite number of time steps.
3. The initial perturbation grows, and so does the divergence between the initial configurations: The Hamming distance is monotonically increasing with time.

If the interaction range in the system is finite, then, due to the discrete spatial nature, damage spreading can only occur linearly in the time limit.

The hamming distance can be deceiving. Consider, for example, a configuration given by alternating ones and zeroes, such that $s_i = i \bmod 2$, another configuration shifted only by one site (or an odd number of sites), resulting in $s_i = (i + 1) \bmod 2$, will have a maximum Hamming distance while, it is clear, that they are conveying the same information.

Instead of using Hamming distance, other authors have used Kolmogorov complexity as the tool of choice [5]. Kolmogorov complexity of a system is given by the length of the shortest algorithm, able to describe the system running on a Universal Turing Machine [6, 7]. Using a Universal Turing Machine in the definitions makes the defined measure absolute up to a constant value. Kolmogorov complexity measures the randomness instead of complexity as it is currently understood (in what follows, we will

use the term Kolmogorov randomness). Distance metrics using Kolmogorov randomness have been defined [8]. Emmert-Streib has used one of such definitions to derive a hierarchical clustering of elementary cellular automata (ECA) [9], which are dynamical systems with nearest neighborhood range interaction acting over a boolean one-dimensional lattice [10]. This approach considers small configurations of cellular automata (CA) with 50 cells and 10^3 time steps. The system spatiotemporal evolution is analyzed as a unique string, by concatenating sequences derived from the temporal evolution [9].

Unlike a Hamming distance, information distances measure the closeness of two configurations by the computational effort of going from one to the other: it is an information distance [11]. The Kolmogorov-based distance will be small for the shift example described above with maximum Hamming distance.

In dynamical systems, such as cellular automata, damage spreading does not need to be a production and random walk process but, instead, can involve, besides the production of new symbols, the structuring of the perturbation as times evolve. This structuring behavior will not be captured by the Hamming-based distance and may affect the information-based distance. For two states, discrete time and space systems, Bagnoli et al. [3] extended the definition of Lyapunov exponents λ by using boolean derivatives, first introduced by Vichniac [12]. They applied the definition to ECA systems. They introduced a parameter μ that proved relevant as a control parameter, related to the fraction p of sites equal to one on the three principal diagonals of the Jacobian matrix [3]. The Hamming distance between two configurations, starting from a single site perturbation, is given by the Boolean Jacobian matrix of the global evolution function F [13]. The Jacobian of F is a tridiagonal matrix of ones and zeros. For a given critical value $p = p_c$, three groups can be identified according to the values of (μ, λ) : a first group with $(\mu, \lambda) = (0, -\infty)$; a second group $\mu > p_c$ and $\lambda > 0$ and; a third group with $\mu \approx p_c$ and $\lambda > 0$. Furthermore, for ECA with $0 < \mu < p_c$ a random perturbation or small noise in the time evolution produces a collapse of the defined Lyapunov exponent to 0 or $-\infty$. In such a way, they could characterize ECA rules through Hamming distance, yet their approach carries the limitations of using Hamming distance as the system metric.

In this article, we will use an information distance based on Kolmogorov randomness to define a Lyapunov exponent. The information distance will be estimated by Lempel-Ziv factorization [14]. Using the μ parameter defined by Bagnoli et al. [3], ECA will be characterized. It will be shown that information distance allows a better partition of ECA rules and captures features of damage spreading that could not be followed by previous measures.

II. CELLULAR AUTOMATA

One dimensional cellular automata (CA) are defined over a lattice of length N (N can be infinite) with sites at time t , labeled as s_i^t , $i = 0, 1, \dots, N$. s_i^t can take values, for a boolean CA, from an alphabet $\Sigma = \{0, 1\}$ of cardinality two. The whole lattice

configuration at time t will be denoted by s^t . A local updating rule f , of range r , is defined such that at time $t + 1$, the value of the site s_i is given by

$$s_i^{t+1} = f[s_{i-r}^t, \dots, s_i^t, \dots, s_{i+r}^t] = f[{}_i^r s^t] \in \{0, 1\} \quad (1)$$

where ${}_i^r s^t$ stands for the subsequence $s_{i-r}^t, \dots, s_i^t, \dots, s_{i+r}^t$.

In what follows circular boundary conditions are enforced: $s_i = s_{(i \bmod N)}$ where $(i \bmod N)$ means that i is reduced module N .

An overlapping partition of the global configuration s^t in blocks ${}_i^r s^t$ of length $2r + 1$ allows applying the local rule f to every block, updating the whole configuration to s^{t+1} and therefore, inducing a global map F . If no ambiguity arises, the r superscript in ${}_i^r s^t$ will be dropped: ${}_i s^t$.

When $r = 1$, the cellular automata are called elementary (ECA), and to each ECA rule f , Wolfram proposed a notation number R that can be computed as [10]:

$$R = f(0, 0, 0)2^0 + f(0, 0, 1)2^1 + \dots + f(1, 1, 1)2^7. \quad (2)$$

ECA rules can be partitioned into 88 equivalence classes as a result of mirror and reversion symmetries [10], and the analysis can then be reduced to a representative member of each type.

Wolfram devised a classification scheme for cellular automata that is still the most used one [1]. Starting from an arbitrary random initial configuration, CA is classified as:

- W1 : System evolves to a homogeneous state;
- W2 : System evolves to a (time) periodic behavior;
- W3 : System evolves to aperiodic chaotic patterns;
- W4 : System evolves to configurations with complex patterns and long-lived, correlated, and localized structures.

Reference to Wolfram classification of rules will be made, which are taken from Wolfram Alpha knowledge engine [15]. It has been proven that Wolfram classification is problematic for CA in classes W3 and W4, as, for a given rule, determining its class turns to be undecidable [16]. Additionally, some rules show high sensitivity to initial conditions, and different initial configurations can lead to different behaviors [10], making their classification even more ambiguous.

III. BOOLEAN DERIVATIVES OF CA, PERTURBATIONS AND LYAPUNOV EXPONENT

Consider a n -variable boolean function f , the partial derivative with respect to the k^{th} variable x_k , is another n -variable boolean function defined as [12, 13]

$$D_k f(x) \equiv \frac{\partial f(x)}{\partial x_k} = f(x) \oplus f(x \oplus e_k) \quad (3)$$

$x = (x_1, \dots, x_{i+n})$ is the n -variable argument of the function, defined in a n -dimensional vector space over the Galois field $\mathbb{F} = \{0, 1\}$, and $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ are the standard basis vectors, $e_1 = (1, 0, \dots, 0)$, $e_2 = (0, 1, \dots, 0)$, $\dots$, $e_n = (0, 0, \dots, 1)$.

$\oplus$ is the addition module 2 operation or boolean XOR

$$\varsigma_1 \oplus \varsigma_2 = \begin{cases} 1 & \varsigma_1 \neq \varsigma_2 \\ 0 & \varsigma_1 = \varsigma_2 \end{cases}$$

The addition $\oplus$ between two vectors is defined as the XOR operation between its components,

$$\mathbf{x} \oplus \mathbf{y} = (x_1 \oplus y_1, x_2 \oplus y_2, \dots, x_n \oplus y_n).$$

The boolean derivative (3) will be zero if, given the vector $\mathbf{x}$, the value of the function f does not depend on the value of x_k ; it will be one otherwise.

The boolean function will correspond to our local rule for the ECA. In such case we can define the Jacobian matrix $J^t(F)$ at time t of the global Boolean function F , with entries

$$J_{ik}^t = \frac{\partial f[s^t]}{\partial s_k} \quad (4)$$

If $|i - k| > 1$, then $J_{ik} = 0$, which renders the Jacobian matrix for ECA rules as a tridiagonal matrix with entries of 1s or 0s. This last fact allows us to deal effectively with the matrix even if we consider the CA lattice infinite. If the lattice has N sites, the Jacobian matrix will be $N \times N$.

Consider an initial configuration $\mathbf{s}^0$ and the initial perturbed configuration $\mathbf{q}^0 = \mathbf{s}^0 \oplus \delta^0$, where δ^0 is a perturbation vector (which is usually taken to be one of the $\mathbf{e}_i$, a minimum perturbation). The perturbed vector at time t will be $\delta^{t+1} = \mathbf{s}^{t+1} \oplus \mathbf{q}^{t+1}$, which can be shown [13] to be given, in a linear approximation, by

$$\delta^{t+1} \approx \bigoplus_{i=1, \dots, N} \delta_i^t \wedge D_i F(\mathbf{s}^t) \quad (5)$$

$\wedge$ is the boolean AND operator

$$\varsigma_1 \wedge \varsigma_2 = \begin{cases} 1 & \varsigma_1 = \varsigma_2 = 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

For the ECA, equation (5) reduces to

$$\delta_i^{t+1} \approx \delta_{i-1}^t \wedge \frac{\partial F}{\partial x_{i-1}} \oplus \delta_i^t \wedge \frac{\partial F}{\partial x_i} \oplus \delta_{i+1}^t \wedge \frac{\partial F}{\partial x_{i+1}} \quad (6)$$

Bagnoli et al. [3] derived a Lyapunov exponent from equation (5) (or eq.6) by the following procedure. Define $\Gamma^0 = \delta^0$, then

$$\Gamma^{t+1} = J^t \cdot \Gamma^t \quad (7)$$

The maximum Lyapunov exponent is defined as

$$\lambda_\Gamma(T) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \log \vartheta_t \quad (8)$$

where the perturbation propagation rate is defined by

$$\vartheta_t = \frac{|\Gamma^{t+1}|}{|\Gamma^t|} \quad (9)$$

where $|\Gamma| = \sum \Gamma_i$. In the infinite limit $\lambda_\Gamma \equiv \lambda_\Gamma(\infty)$.

For ECA, consider $\mu(t)$ as the fraction of sites that are different from zero on the three principal diagonals of $J(F)$

$$\mu(t) = \frac{1}{3N} \sum_{i=1}^N (J_{i,i-1} + J_{i,i} + J_{i,i+1}) \quad (10)$$

which allows to define a parameter $\mu(T)$ as the geometric mean for large enough time T

$$\mu(T) = \left(\prod_{t=1}^T \mu(t) \right)^{1/T} \quad (11)$$

$\mu(T)$ has been used to characterize the Jacobian matrix and therefore the corresponding ECA rule [3].

To understand the meaning of Γ , consider the limit of small initial perturbation, which corresponds to a single site difference in the initial configurations; when, during evolution, n defects appear, replicas for each produced perturbed site are considered. By doing so, perturbed sites are taken as individual non-interacting objects, and the annihilation of defects is impossible. Γ_i^t is the number of replicas carrying the defect $\mathbf{e}_i^t$ at time t [3].

It must be noticed that the Lyapunov exponent, as defined by equation (8), characterizes the damage production but not its structuring. They are insensible to whether perturbations are generated in a specific pattern or if they are generated and undergo some unpredictable random walk. To capture the possible structuring of perturbation production, we must resort to a different measure, and for that, Kolmogorov algorithmic randomness will be used.

IV. KOLMOGOROV BASED NORMALIZED INFORMATION DISTANCE, PERTURBATIONS AND LYAPUNOV EXPONENT

Given the shortest program s^* that, when running in a Universal Turing Machine (UTM), reproduces the string s , the Kolmogorov complexity or Kolmogorov randomness $K(s)$ of the string is the length of s^* [7],

$$K(s) = |s^*|. \quad (12)$$

Kolmogorov randomness measures how easier it is to convey the information in s using a shorter description s^* . At most, the Kolmogorov randomness will be equal to the string length when the string has no redundancy, which happens for a completely random sequence. The UTM condition is needed to make the definition sound. While Kolmogorov randomness is maximum for a random string, it will attain its smallest value for a constant sequence of only one symbol. The conditional Kolmogorov randomness $K(s|p)$ is the length of the shortest program that can compute s from the string p . If p conveys much information regarding s , then $K(s|p)$ will be small. The joint Kolmogorov randomness $K(s, p)$ is the size of the smallest program that computes both strings s and p . From a theoretical point of view, the most common type of program allowed for defining Kolmogorov randomness is prefix-free,

where no program is a proper prefix of another program [7]. It holds that

$$K(s, p) \cong K(s) + K(p|s^*) = K(p) + K(s|p^*) \quad (13)$$

where $\cong$ denotes that equality is valid up to a constant value independent of p and s .

Kolmogorov randomness is uncomputable, a fact related to the halting problem [7], but the entropy density defined by

$$h(s) = \lim_{|s| \rightarrow \infty} \frac{K(s)}{|s|} \quad (14)$$

can be estimated in several ways. The entropy density defined in (14) is equivalent to the entropy density defined within Shannon information theory, which opens the possibility to use estimates of Shannon entropy rates as estimates of $h(s)$.

It is straightforward to see that the information about s contained in p can be defined by

$$I(s : p) = K(s) - K(s|p^*). \quad (15)$$

Which, as a result of equation (13), is symmetrical, up to a constant, on its arguments: $I(s : p) \cong I(p : s)$.

Now we are in a condition to define the information distance between two sequences s and p as [8]:

$$d_{ID}(s, p) = \frac{\max\{K(s|p^*), K(p|s^*)\}}{\max\{K(s), K(p)\}} = 1 - \frac{I(s : p)}{K(p)} \quad (16)$$

d_{ID} complies, up to a constant value, with the triangle inequality, the symmetry axiom, and the identity axiom.

$d_{ID}(s, p)$ differs from a Hamming-type distance; it is not a direct damage field measure but, instead, is an information distance because it quantifies how correlated two sequences are from the algorithmic or information perspective. Two sequences that can be derived one from the other by a small-sized algorithm will have a small d_{ID} . In comparison, two strings that are not algorithmically correlated will have a d_{ID} near one. From the definition, the reader can see that if two sequences are highly random, but one is very similar site by site, they will have a small Hamming distance and a small d_{ID} value. However, two sequences, one being a shift of the other, can have a large Hamming distance and yet will deliver a small d_{ID} value, as the shifting program is simple and small compared to the string lengths.

We can cast equation (16) in terms of entropy density by dividing the numerator and the denominator by the string length and considering that $|s| = |p|$

$$d_h(s, p) = \frac{\max\{h(s|p^*), h(p|s^*)\}}{\max\{h(s), h(p)\}} \quad (17)$$

which, using (13), can be written as

$$d_h(s, p) = \frac{h(s|p) - \min\{h(s), h(p)\}}{\max\{h(s), h(p)\}} \quad (18)$$

The halting problem makes it impossible to compute Kolmogorov randomness, which is the main drawback

in its practical use; instead, alternatives based on the compressibility of the mathematical description of the system are usually introduced [11]. The Lempel-Ziv factorization will be used to estimate the entropy density, as the supplementary material explains.

Consider an initial configuration s^t and the perturbed configuration $q^t = s^t \oplus \delta^t$; for any time step, the information distance between both sequences can be computed $d_h(s^t, q^t) \equiv d_h^t$. A similar expression to (9) can be defined,

$$\zeta_t = \frac{d_h^{t+1}}{d_h^t} \quad (19)$$

From there, a corresponding Lyapunov exponent follows

$$\lambda_h(T) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \log \zeta_t \quad (20)$$

Again, $\lambda_h(\infty) \equiv \lambda_h$.

V. SIMULATION CONDITIONS

1. For the calculation of λ_Γ , a lattice of 512 cell was used, 5000 time steps were taken.
2. For the calculation of λ_h a lattice of 10^4 cell was used, 10^4 time steps were taken.

The difference in the system sizes is justified in terms of computation efficiency. Lempel-Ziv estimations need longer sequences to guarantee a better estimation as the convergence of the estimates is slow [11].

Ten different random initial conditions were used in both cases, taken from <http://www.random.org>. Perturbation on the initial conditions was done by changing a single site at the centre of the initial lattice configuration.

VI. DAMAGE SPREADING CHARACTERIZATION BY LYAPUNOV EXPONENTS

Bagnoli et al. [3] definition of the Lyapunov parameter λ_Γ is not exactly a sum over the Hamming distance spreading. By making replicas of each error as it appears, the annihilation of defects is not taken into account; this results in the Hamming field may saturate while the Lyapunov factor continues to grow.

By definition, if $\lambda_\Gamma < 0$, the damage field is contractive, and after several steps, both the perturbed and the non-perturbed systems will behave identically. As defect interaction is not taken into account, the contractive nature of the damage field can only be a result of the interaction of the defect with the underlying configuration, identical in both perturbed and non-perturbed systems. Error annihilation overcomes error production. If $\lambda_\Gamma > 0$, error production increases with time, overcoming error annihilation by interaction with the underlying configuration. For $\lambda_\Gamma = 0$, after a sufficient number of steps, error production and annihilation equal.

Simulation results lead to the characterization of rules' behavior concerning their maximum Lyapunov exponent λ_Γ in five types:

- Rules have strong (single) Lyapunov value $\lambda_\Gamma = -\infty$; that is, the value of the exponent is independent of the initial random condition.
- Rules have strong (single) Lyapunov value $\lambda_\Gamma = 0$ also independent of the initial random condition.
- Rules can have two Lyapunov values $\lambda = -\infty$ or $\lambda_\Gamma = 0$ depending on the initial random condition.
- Rules have strong (single) Lyapunov value $\lambda_\Gamma > 0$ independent of the initial random condition.
- Depending on the initial random condition, rules have a mixture of two or more behaviors, one resulting in a Lyapunov value of $\lambda_\Gamma > 0$.

Maximum Lyapunov exponents for all rules are listed in Table 1, while rules with strong behaviors are listed in Table 2.

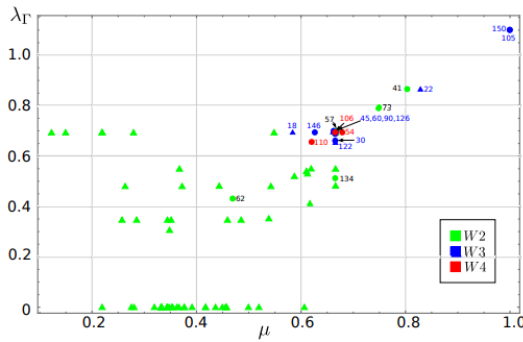


Figure 1. Non-negative maximum Lyapunov exponent (eq. (8)) as a function of the μ parameter for the all minimum equivalent ECA. Results were obtained from simulations carried over each cellular automaton with a 512-cell random initial condition evolving during 2500 time steps using a single site perturbation at the initial time. The average value over 10 realizations is shown. Triangles correspond to rules with also negative or zero Lyapunov exponents.

Fig. 1 shows the maximum Lyapunov exponent λ_Γ for each non-equivalent ECA for which $\lambda_\Gamma \geq 0$, as a function of the μ parameter. Up to $\mu < 0.42$, all rules belong to Wolfram class W1 and W2 and have at least one λ_Γ negative or zero value. A number of these rules can also show a positive maximum Lyapunov exponent, depending on the initial condition. Strong $\lambda_\Gamma = -\infty$ rules all have a $\mu = 0$ value, and they belong to W1 type in the Wolfram classification scheme. All rules with strong $\lambda_\Gamma = 0$ values, have $\mu < 0.44$ except rule 56 with $\mu = 1/2$. According to Bagnoli et al. [3], a second-order phase transition occurs in the random matrix approximation at $\mu_c = 0.441$. The same study found that for rules with $\mu < \mu_c$, the maximum Lyapunov exponent collapses to a negative or zero value if noise is added to their evolution. Our simulations show that for all rules with a μ value below the critical value μ_c , the probability of a positive maximum Lyapunov exponent is much lower than the probability of a non-positive exponent.

¹ $LCM(a, b)$ is the least common multiple of integer numbers a and b .

All rules with strong positive maximum Lyapunov exponent have μ values larger than μ_c .

Rules with constant Jacobian matrix have $\lambda_\Gamma = \log(3\mu)$.

$\lambda_\Gamma > 0$ rules can be in any of the Wolfram classifications, except W1, which is not surprising for W3 and W4 rules but can come as a surprise for W2 type rules. W2 rules for long enough times to settle into fixed configurations or periodic behavior. In either case, this fact and the discrete nature of time imply that the perturbation field cannot grow indefinitely. Suppose the orbit of the unperturbed and perturbed initial condition will end in a periodic cycle of periods T_0 and T_p , respectively. In that case, the corresponding damage field will also exhibit a periodic cycle of period $LCM(T_0 \times T_p)$ ¹. As a result, for all W2 rules, an ever-expanding damage field should not happen, and the perturbation value d^t will eventually saturate.

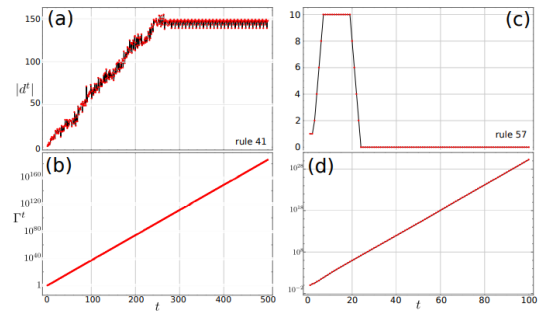


Figure 2. W2 rules with strong $\lambda_\Gamma > 0$ condition. Rule 41 (a) after an initial spreading of defects settles into a periodic behavior, yet (b) Γ^t increases exponentially. Rule 57 (c) collapses its damage field to zero after a few time steps, yet (d) Γ^t still shows an exponential increase.

Rules W2 that can show positive λ_Γ values show two trends; in one case, for certain rules and initial conditions, the ECA evolution ends in a periodic behavior with a period larger than one. Rules 1, 3, 5–7, 9, 25–29, 33, 35, 37, 38, 41, 57, 62, 73, 74, 94, 108, 134, 154, 156 show such damage field cycles with periods larger than one. Fig. 2a and b shows rule 41 as an example of this class. Observe that in spite that Γ^t has exponential growth, the defect field, for sufficiently long times, has a periodic behavior. No periodic cycle can be identified in the second case, even for long running times. In this case, despite the exponential growth of the Γ^t values (Fig. 2d), the damage field ends into a constant value (Fig. 2c). In both cases, defects are massively produced by the ECA rule, as reflected by the exponential growth of Γ , but also massive defect annihilation occurs as a consequence of defect interaction, mediated by the whole of the cell configuration. In both cases, $\lambda_\Gamma > 0$ does not signal uncontrolled damage spreading in the context of the particular ECA rule evolution.

In those W2 rules with strong positive λ_Γ values (rules 41, 57, 62, 73, 134), it is the rule which enforces both defect production and annihilation, independent of the lattice configuration. This dynamic results in either the freezing of the damage field into a local periodic pattern or its complete disappearance (see Fig. 3). For those rules where $\lambda_\Gamma > 0$ coexist with other behaviors, the production of defects is mediated by the cell environment.

It should be noticed that W3 rules 18, 22, 122, and 126 are usually perturbation expansive ($\lambda_\Gamma > 0$) but, for certain initial conditions, can show a negative maximum Lyapunov exponent. Finally, rules 105 and 150 exhibit the largest λ_Γ value of $\log 3$, corresponding to a constant Jacobian matrix with all derivatives equal to 1. The damage field of these two rules shows fractal behavior (see Fig. 3 for rule 150).

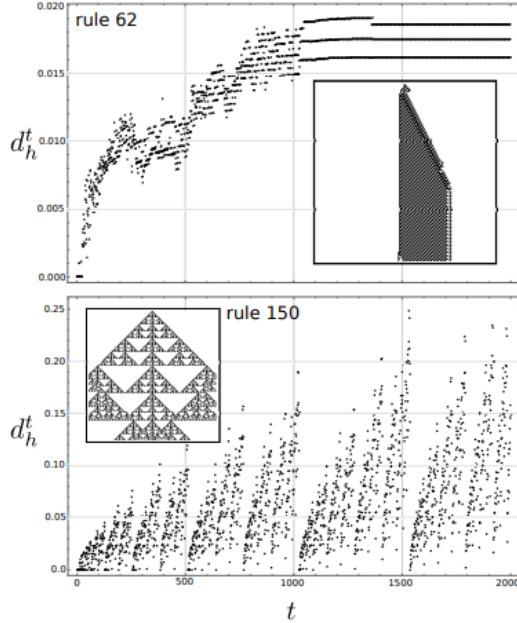


Figure 3. Information distance behaviour for two rules with strong $\lambda_\Gamma > 0$. Perturbed sequence has as initial sequence the same as the unperturbed sequence, with only the central site negated. Damage field were calculated by plotting in black those sites were the unperturbed and perturbed values are different, and are shown as inset to the figures, as a function of time. The Rule 62 (above) settles into a damage field (inset) with periodic spatial behavior. This results in a small d_h^t , of the order 10^{-2} , value for all times, in spite that the damage field initially spreads and finally saturates. Rule 150 (below) has a fractal damage field (inset). The d_h^t values are an order of magnitude larger than in rule 42.

When λ_h is plotted against λ_Γ , as shown in Fig. 4, there is no linear relation between both magnitudes; furthermore, there is no strict monotonic relation between them. Certainly, rules with the higher λ_Γ also correspond to the higher λ_h values, which also conform mostly to W3 and W4 type rules. The second interesting fact of Fig. 4 is that all W2 rules have smaller λ_h values than the more complex rules of type W3 and W4. Third, some rules with large $\lambda_\Gamma (> 0.6)$ have λ_h values near zero (rules 72, 104, 108, 200, 232). Even a strong $\lambda_\Gamma > 0$ rule, such as 134, shows a near zero λ_h value. Rule 57 with $\lambda_\Gamma > 0.6$ has a small λ_h value compared to the W3 and W4 rules. The only W2 rule with $\lambda_\Gamma > 0.6$ that have a larger λ_h value compared to the other rules of the same type is rules 73, which shows an asymptotic temporal periodic pattern of period larger than one and with a rich structured spatial organization, resulting in large damage field spread before freezing. This rule is far from producing a trivial spatiotemporal map.

The rules with the largest λ_h values are Wolfram numbers 60, 90, 105, and 150, with values well above other rules. The three

rules have fractal damage spreading field.

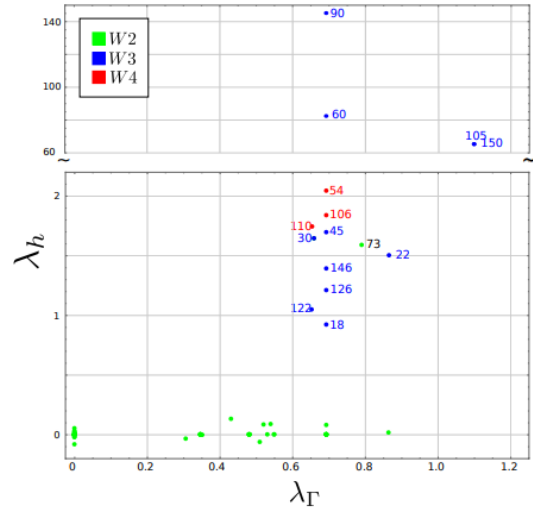


Figure 4. λ_h vs maximum Lyapunov exponent based on Hamming distance λ_Γ (eq. 8). λ_h was estimated using Lempel-Ziv factorization over cellular automaton lattice of 10^4 sites and averaged over ten different random initial conditions using a single site perturbation at the initial time. λ_Γ was estimated same as in figure 5. Only $\lambda_\Gamma > 0$ are shown.

Compare the behavior of the d_h^t function for rules 62 and 150. The first, which has a strong $\lambda_\Gamma > 0$ behavior, has a damage field that ends in periodic behavior (Fig. 3 above, inset). The d_h^t function reflects the long-term periodic behavior, characterized by a tree value cycle (Fig. 3 above). In any case, the d_h^t does not exceed the value of 0.020. For the 150 rule, as already explained, the damage field has a fractal character (Fig. 3 below, inset) which is captured by the d_h^t function (Fig. 3 below). The value of the d_h^t is an order of magnitude larger than the 62 rule. In both cases, Γ^t shows exponential growth, unable to capture the differences in the spatiotemporal evolution of both rules.

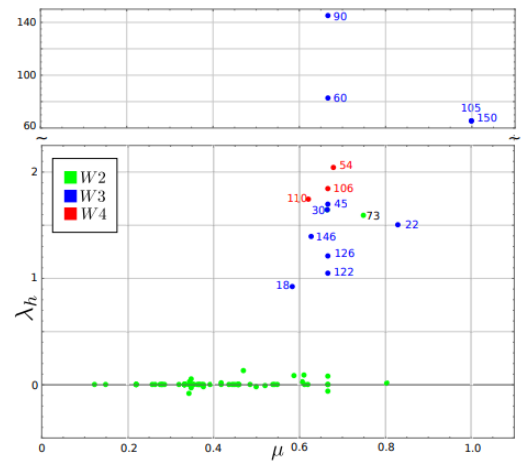


Figure 5. Lyapunov exponent based on information distance λ_h (eq. (20)) as a function of the μ parameter. Lyapunov exponents were estimated as in figure 4. A clear clustering of W3 and W4 type rules can be seen.

Fig. 5 plots the λ_h as a function of μ . Compared to fig 1, the use of λ_h allows a clear clustering of W3 and W4 rules from the non-complex one.

VII. CONCLUSION

In this work, we have shown that it is possible to introduce a Lyapunov exponent based on information distance as defined through Kolmogorov randomness. The measure capture characteristics of ECA evolution, which are not captured by previously defined maximum Lyapunov exponent based on Hamming distance. As information distance is related to the algorithmic burden of going from one sequence to a second one, information distance is not a Hamming-type distance but is sensible to perturbation structuring. In this last sense, it complements the use of λ_T . While positive λ_T values can falsely identify unlimited damage spreading, simulations show that λ_h allows a better clustering of ECA rules in correspondence to better characterizing chaotic behavior.

The Lyapunov exponent λ_h is not limited to cellular automata analysis but can be readily extended to other discrete time and space one-dimensional series.

VIII. APPENDIX: LEMPEL-ZIV FACTORIZATION AND ESTIMATION OF ENTROPY DENSITY

Consider a string s , of finite length N , made out of characters s_i taken from finite alphabet (e.g $\{0,1\}$). Let $s(i, j) = s_i \dots s_j$ be a substring of the string s ; if $j < i$, then we take the substring as empty. A factorization of s , is a non-overlapping partition of the string s in substrings, such that, if we consider ab as the concatenation of string a and b , then we can write $s = s(1, l_1)s(l_1 + 1, l_2) \dots s(l_{c-1}, l_c = N)$. The Lempel-Ziv factorization [?] $F(s)$ is constraint by the following two conditions for each substring in the factorization:

1. $s(l_{k-1} + 1, l_k)\pi \subset s(1, l_k)\pi^2$
2. $s(l_{k-1} + 1, l_k) \not\subset s(1, l_k)\pi$ except, perhaps, for the last factor $s(l_{m-1} + 1, N)$.

Where the "drop" operator π is defined as

$$s(i, j)\pi = s(i, j - 1)$$

and, consequently,

$$s(i, j)\pi^k = s(i, j - k).$$

The partition $F(s)$ is unique for every string.

For example, the Lempel-Ziv factorization of the sequence $u = 10011101001011$ is $F(s) = 1.0.01.11.010.0101.1$, where a dot delimits each factor.

The LZ76 complexity $C_{LZ}(s)$ ($= |F(s)|$) of the sequence s , is defined as the number of factors in its factorization. In the example above, $C_{LZ}(s)=7$.

Defining

$$c_{LZ}(s) = \frac{C_{LZ}(s)}{N / \log N}. \quad (21)$$

Ziv [17] proved that, if s is the output from an ergodic source, then

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} c_{LZ}(s) = h(s). \quad (22)$$

Where $h(s)$ is the same entropy rate given by equation (14). This is the base of using c_{LZ} as an estimate of h_μ for $N \gg 1$.

Eq. (22) is valid in the infinite limit. In practical cases, eq. (21) is used as an estimate for the entropy density (further details can be found in [11]).

IX. ACKNOWLEDGEMENTS

EER and KG will like to thank AvH for their financial support. DEM and EER will like to thank MPI-PKS for financial support under visiting grants.

REFERENCES

- [1] S. Wolfram, Phys. D **10**, 1 (1984).
- [2] H. Kantz and T. Schreiber, Nonlinear time series analysis (Cambridge University Press, Cambridge, New York, 2003).
- [3] F. Bagnoli, R. Rechtman and A. Enciso, Chaos **7**, 688 (1997).
- [4] J. Urias, R. Rechtman and A. Enciso, Chaos **7**, 688 (1997).
- [5] J. C. Dubacq, B. Durand and E. Formenti, Th. Comp. Science **259**, 271 (2001).
- [6] A. N. Kolmogorov, Probl. Inf. Transf. (English Trans.) **1**, 1 (1965).
- [7] M. Li and P. Vitányi, An Introduction to Kolmogorov Complexity and Its Applications, (Springer Verlag, 1993).
- [8] M. Li, X. Chen., X. Li, B. Ma and P. M. B. Vitanyi, IEEE Trans. Inf. Th. **50**, 3250 (2004).
- [9] F. Emmert-Streib, Phys. Rev. E **81**, 026103 (2010).
- [10] S. Wolfram, A new kind of science (Wolfram media Inc., Champaign, Illinois, 2002).
- [11] E. Estevez-Rams, R. L. Serrano, C. A. J. Nunes and B. Aragon-Fernández, Chaos **25**, 123106 (2015).
- [12] G. Vichniac, Physica D **45**, 62 (1997).
- [13] A. M. del Rey, G. R. Sánchez and A. de la Villa Cuenca, Appl. Math. Lett. **25**, 739 (2012).
- [14] A. Lempel and J. Ziv, IEEE Trans. Inf. Th IT-22, 75 (1976).
- [15] Wolfram Research Inc., Wolfram alpha knowledge engine (2019), (Available online at <http://www.wolframalpha.com/>).
- [16] K. Culik and S. Yu, Complex Systems **2**, 177 (1988).
- [17] J. Ziv, IEEE Transf. Inf. Th IT-24, 405 (1978).

Table 1. List of maximum Lyapunov exponent λ_Γ and μ values for all non-equivalent ECA rules. Blue corresponds to W3 type rules and red to W4 type rules².

No.	λ_Γ	μ	No.	λ_Γ	μ
0	$-\infty = \log(3\mu)$	0	56	0	1/3
1	$-\infty; 0; 1/2 \log 3$	0.368(2)	57	$\log 2 = \log(3\mu)$	2/3
2	$-\infty; 0$	1/3	58	$-\infty; 0$	0.417(6)
3	$-\infty; 0; 1/2 \log 2$	0.352(6)	60	$\log 2 = \log(3\mu)$	2/3
4	$-\infty; 0$	0.344(4)	62	0.43(2)	0.47(2)
5	$-\infty; 0; 1/2 \log 2$	0.345(6)	72	$-\infty; \log 2$	0.15(2)
6	$-\infty; 0; 0.54(1)$	0.611(3)	73	0.79(3)	0.749(4)
7	$-\infty; 0; 1/2 \log 2$	0.258(7)	74	$-\infty; 0$	0.520(6)
8	$-\infty$	0	76	$-\infty; 0$	0.32(1)
9	$-\infty; 0$	0.607(2)	77	$-\infty; 0$	0.22(2)
10	$-\infty; 0$	1/3	78	$-\infty; 0; 0.480(3)$	0.373(3)
11	$-\infty; 0$	0.3774(8)	90	$\log 2 = \log(3\mu)$	2/3
12	$-\infty; 0$	1/3	94	$-\infty; 0; 1/2 \log 2$	0.486(5)
13	$-\infty; 0.48(2)$	0.26(1)	104	$-\infty; \log 2$	0.12(2)
14	$-\infty; 0$	0.34(1)	105	$\log 3 = \log(3\mu)$	1
15	$0 = \log(3\mu)$	1/3	106	$\log 2 = \log(3\mu)$	2/3
18	$-\infty; \log 2$	0.584(2)	108	0; $\log 2$	0.549(8)
19	$-\infty; 0; 1/2 \log 2$	0.28(1)	110	0.654(3)	0.6212(2)
22	$-\infty; 0.865(2)$	0.830(1)	122	$-\infty; 0.652(3)$	2/3
23	$-\infty; 0; \log 2$	0.22(2)	126	$-\infty; \log 2$	2/3
24	$-\infty; 0$	0.458(4)	128	$-\infty$	0
25	$-\infty; 0.52(1)$	0.588(2)	130	$-\infty; 0$	1/3
26	$-\infty; 0; 0.411(3)$	0.6176(5)	132	0	0.355(6)
27	$-\infty; 0$	0.458(4)	134	0.51(1)	2/3
28	0; 0.48(1)	0.543(3)	136	$-\infty$	0
29	0; $1/2 \log 2$	0.460(6)	138	$-\infty; 0$	0.367(7)
30	0.6596(6)	0.6665(1)	140	$-\infty; 0$	0.353(9)
32	$-\infty$	0	142	$-\infty; 0.306(3)$	0.349(9)
33	0; 0.55(7)	0.620(2)	146	$\log 2$	0.6273(6)
34	$-\infty; 0$	1/3	150	$\log 3 = \log(3\mu)$	1
35	$-\infty; 0$	0.437(2)	152	$-\infty; 0$	0.456(3)
36	$-\infty; 0$	0.377(9)	154	0; 0.482(9)	2/3
37	0; 0.352(4)	0.539(2)	156	0; $\log 2$; $1/2 \log 3$	2/3
38	$-\infty; 0; 0.53(1)$	0.613(2)	160	$-\infty$	0
40	$-\infty$	0	162	$-\infty; 0$	0.276(7)
41	0.864(1)	0.8036(8)	164	0	0.392(6)
42	$-\infty; 0$	0.363(3)	168	$-\infty$	0
43	$-\infty; 0$	0.34(1)	170	$0 = \log(3\mu)$	1/3
44	$-\infty; 0; 0.481(1)$	0.444(5)	172	$-\infty; 0$	0.418(4)
45	$\log 2 = \log(3\mu)$	2/3	178	$-\infty; 0; \log 2$	0.22(1)
46	$-\infty; 0$	0.450(8)	184	0	0.344(7)
50	$-\infty; 0$	0.281(8)	200	$-\infty; 0; \log 2$	0.28(1)
51	$0 = \log(3\mu)$	1/3	204	$0 = \log(3\mu)$	1/3
54	$\log 2$	0.680(1)	232	$-\infty; 0; \log 2$	0.22(1)

Table 2. Strong type rules. Blue corresponds to W3 rules and W4 rules in red.

strong $\lambda_\Gamma < 0, \mu = 0$								
rule	0	8	32	40	128	136	160	168
strong $\lambda_\Gamma = 0, W2$								
rule	15	51	56	132	164	170	184	
strong $\lambda_\Gamma > 0$								
rule	30	41	45	54	57	60	62	73
	90	105	106	110	134	146	150	

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.



²The number between parentheses is the error in the calculation.

DE MEDICIONES, INCERTIDUMBRE Y REALIDAD: EL PREMIO NOBEL DE FÍSICA DE 2022

ON MEASUREMENTS, UNCERTAINTY AND REALITY: NOBEL PRIZE IN PHYSICS 2022

O. DE MELO^{a,b,†}

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Habana, CP. 10400, Cuba; odemelo@gmail.com[†]

b) Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, A.P. 70-360, Coyoacán 04510, México D. F.

† autor para la correspondencia

Recibido 28/4/2022; Aceptado 20/11/2022

Con motivo del Premio Nobel de Física de 2022, en este trabajo se hace un recuento de los hitos fundamentales relacionados con algunos problemas en los fundamentos de la Física Cuántica. Luego de un breve esbozo histórico, se discuten la superposición de estados, el carácter aleatorio de las mediciones, la encriptación y entrelazamiento cuánticos, y el fenómeno de la teletransportación cuántica. Además, se analiza el significado de la paradoja Einstein-Podolski-Rosen y del teorema de Bell. Se describen algunos de los experimentos realizados por los premiados de 2022 para analizar el cumplimiento o la violación de la desigualdad de Bell y, por tanto, la resolución del conflicto entre las teorías de las variables ocultas locales y la Física Cuántica. Finalmente, se comenta sobre algunas de las más relevantes interpretaciones de la Física Cuántica como la de los universos múltiples, la mecánica de Bohn, y, desde luego, la interpretación de Copenhagen.

In the wake of the 2022 Nobel Prize in Physics, this paper recounts the fundamental milestones related to some problems in the foundations of Quantum Physics. After a brief historical journey, the superposition of states, the random character of measurements, quantum encryption and entanglement and the phenomenon of quantum teleportation are discussed. The meaning of the Einstein-Podolski-Rosen paradox and Bell's theorem are also analyzed. Some of the experiments carried out by the 2022 laureates aimed at analyzing the fulfillment or violation of Bell's inequality and the resolution of the conflict between local hidden variables theory and Quantum Physics are described. Finally, some of the most relevant interpretations of Quantum Physics are discussed, such as those of multiple universes, Bohn's mechanics and, of course, the Copenhagen interpretation.

PACS: Quantum entanglement (entrelazamiento cuántico), 03.65.Ud; Bell inequalities (desigualdades de Bell), 03.65.Ud; Philosophy of science (filosofía de la ciencia), 01.70.+w

I. INTRODUCCIÓN

En el pasado, algunos temas exóticos de la Física Cuántica (FC) han sido relegados a un segundo plano. Durante mucho tiempo fueron circunscritos más bien al campo de la metafísica o la filosofía y su estudio pareció a veces, en opinión de muchos físicos (y también de no físicos), una especie de entretenimiento, en gran medida inútil. Sin embargo, ingentes esfuerzos científicos han hecho que estos temas hayan renacido, no sólo en la física (donde surgieron), sino también en la tecnología avanzada. La criptografía cuántica, por ejemplo, es hoy una aplicación vigente de esos problemas exóticos. Por su parte, la computación cuántica, si bien aún en sus inicios como tecnología, ofrece potencialidades que, de confirmarse, pudieran dar lugar a cambios decisivos en las más diversas prácticas humanas. El premio Nobel de Física de 2022 ha sido adjudicado a Alain Aspect (Francia), John F. Clauser (Estados Unidos) y Anton Zeilinger (Austria), tres científicos que han contribuido a que esos temas exóticos hayan pasado a ser parte importantísima de la ciencia constituida.

Luego de un brevísimo esbozo histórico, aquí se expondrá la evolución de temas tales como la incertidumbre de las mediciones, la superposición, el entrelazamiento y la teletransportación cuánticas. Siempre que se pueda, se tomará como ejemplo la polarización de los fotones, con lo

que se pretende mostrar que contenidos de este tipo pudieran ser introducidos en los cursos de física general o incluso en la enseñanza media. De hecho, un objetivo de este trabajo es generar entusiasmo hacia el estudio y la difusión de estos temas y, en particular, a su introducción en la enseñanza de la física en los diferentes niveles y en las diferentes carreras universitarias: desde las ingenierías hasta la filosofía. Se describirán los principales hitos en los debates que a lo largo de la historia se han generado en el tema: desde las paradojas de Einstein-Podolski-Rosen-Bohn y del gato de Schrödinger, hasta la desigualdad de Bell, y se describirán los principales experimentos protagonizados por los laureados con el Nobel de Física de 2022. Finalmente, se comentará sobre algunas de las más relevantes interpretaciones de la Física Cuántica como la de los universos múltiples, la mecánica bohmiana, y la interpretación de Copenhagen. Se incluye un anexo con las direcciones de algunos recursos educativos en-línea relacionados con estos temas, de muy reciente aparición en la red de redes, que incluyen “juegos cuánticos,” y demostraciones virtuales.

II. ESBOZO HISTÓRICO

Los trabajos de Max Planck presentados entre octubre y diciembre de 1900 en la Sociedad Alemana de Física dieron comienzo a una nueva era dentro de la Física. Para encontrar una ley de la radiación del cuerpo negro, Planck había seguido

el algoritmo de la estadística de Boltzmann según el cual se consideraba que la energía de los osciladores armónicos era un múltiplo de una cierta cantidad finita, ϵ . Sólo que, al contrario de Boltzmann, Planck se abstuvo de tomar el límite $\epsilon \rightarrow 0$ al final del cálculo para que la teoría pudiera ajustarse a los resultados experimentales, o sea, para que la densidad de energía radiante no tendiera a infinito a altas frecuencias [1]. Esto fue catalogado por el propio Planck años después como un “acto de desesperación” y considerado como un error por algunos de sus ilustres contemporáneos (incluyendo aquellos pocos que en el continente europeo aceptaban la teoría cinético-molecular en la que se basaba la estadística de Boltzmann). Cuatro largos años transcurrieron en los que la teoría que iría a revolucionar la ciencia se mantuvo prácticamente desconocida. Fue Albert Einstein en uno de sus famosos artículos de 1905 que la llevó un paso adelante con la suposición de que no sólo los osciladores, sino la radiación misma se componía de paquetes discretos de energía [2] con lo cual dio explicación al efecto fotoeléctrico y a la fotoluminiscencia, que no se ajustaban a las predicciones de la física clásica. El próximo paso importante en la teoría cuántica fue el modelo del átomo, publicado por Niels Bohr en 1913, que incluía la hipótesis de la cuantización de la energía de los átomos [3] para resolver las contradicciones del modelo previo de Ernest Rutherford [4], con la teoría del electromagnetismo. Este período inicial de la historia de la FC se considera completado con la introducción del espín del electrón por Wolfgang Pauli [5]. Una colección de los trabajos más importantes de este período inicial de desarrollo de la teoría puede encontrarse en la ref. [6]. El próximo avance de la teoría fue la formalización matemática, debida a Werner Heisenberg [7] y Erwin Schrödinger [8] entre 1925 y 1926. Este último basó su formulación en una propuesta previa de Louis de Broglie [9] en la que asociaba ondas (de Broglie las llamó “ondes de phase”) al movimiento de las partículas. Schrödinger también demostró más adelante la equivalencia de su formulación ondulatoria con la de Heisenberg. Por esa época empezaron los debates sobre los fundamentos de la FC.

III. LA POLARIZACIÓN DE LA LUZ Y LA FÍSICA CUÁNTICA

Según la ley de Malus, si I_0 es la intensidad de la luz cuya dirección de polarización forma un ángulo θ con el eje de un material polarizador (analizador), la intensidad que atraviesa el analizador se puede calcular como $I = I_0 \cos^2 \theta$. Si en vez de un analizador común tenemos un analizador de dos canales, por ejemplo, un cristal de calcita, la luz incidente se dividirá en dos haces: uno con dirección de polarización a lo largo del eje óptico del cristal (rayo ordinario) y otra con dirección perpendicular. Las intensidades de los haces serán $I = I_0 \cos^2 \theta$ e $I = I_0 \sin^2 \theta$, respectivamente, de modo que la intensidad total será igual a la intensidad de la luz antes de pasar el polarizador. Asimismo, si es luz natural lo que llega al analizador (o sea luz con componentes de polarización distribuidas aleatoriamente en cualquier dirección perpendicular a la de propagación), la intensidad luego del paso por el analizador será $I_0/2$. En el caso de un polarizador de dos canales, será esa misma intensidad en cada

canal, o sea en cada dirección de polarización. Esto es tema de estudio de cualquier curso universitario de Física General, incluso en la enseñanza media superior.

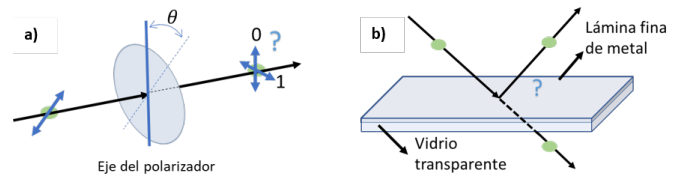


Figura 1. a) Si un fotón tiene una polarización que forma un ángulo θ con el eje de un polarizador, emergerá del mismo o bien con polarización vertical o bien no emergerá, pero no es posible predecir a-priori cuál de las dos opciones ocurrirá. Sólo se puede conocer la probabilidad de cada caso. La probabilidad del resultado que hemos llamado “0” o polarización vertical es $\cos^2 \theta$ mientras que la posibilidad del resultado “1” o polarización horizontal es $1 - \cos^2 \theta$ (en este caso el fotón no emerge del polarizador). Se dice que la polarización del fotón no está definida: el fotón está en un estado de superposición de las polarizaciones vertical y horizontal. b) Un haz de luz se divide por medio de una lámina semitransparente, una parte se refleja y otra se transmite. Para un determinado ángulo las intensidades de los dos haces son iguales. Cada fotón que llega “elige” transmitirse o reflejarse; no se puede predecir a-priori cuál de las dos opciones “elegirá”. En este caso lo que se indefinice en el fotón incidente es la dirección con la que emergerá de la lámina; el fotón está en un estado de superposición entre las dos direcciones.

Para introducir la FC en este asunto y empezar a encarar los tópicos extraños que contiene, podemos suponer que disminuimos mucho la intensidad de la luz incidente en el analizador hasta que los fotones que componen el haz de luz vayan llegando de uno en uno (en la actualidad existen fuentes de fotones individuales, esto ha dejado de ser una suposición teórica) y que, para simplificar nuestra explicación, el eje óptico del analizador es vertical, como se muestra en la Fig. 1 a). ¿Qué ocurre con un fotón polarizado en una dirección que forma un ángulo θ con el eje del analizador? ¿Emerge del polarizador con polarización vertical, o no emerge? Esta es una pregunta clave para introducir de manera natural la incertidumbre involucrada en una medición de un objeto cuántico: no hay forma de saber con certeza con qué polarización va a emerger el fotón del analizador. Para cumplir con la ley de Malus, tendremos que suponer que, de un gran número N de fotones incidentes, una fracción igual a $\frac{N_v}{N} = \cos^2 \theta$ emergerá con polarización vertical y otra fracción, $\frac{N_H}{N} = \sin^2 \theta$ no emergerá. Pero, para un número grande de fotones, N_H/N y N_v/N son, respectivamente, las probabilidades de que un fotón no emerja del analizador, o que emerja con polarización vertical. Esto es lo más que podemos saber de un fotón que incide en un polarizador: la probabilidad de que su polarización a la salida sea vertical y atraviese el analizador, o sea horizontal y no lo atraviese. Lógicamente, si el ángulo es 45° , estas probabilidades son iguales a $1/2$: como promedio, la mitad de las veces el fotón saldrá con polarización vertical y la mitad de las veces con no emergerá del analizador. Una pregunta sobre la dirección que tendrá la polarización del fotón al salir del analizador no tiene respuesta. Esa información no existe a priori: la FC no es determinista en ese sentido (al menos según su interpretación más extendida). De hecho, midiendo la polarización de una colección de fotones que emergen del polarizador en las condiciones antes descritas, se obtendrá una lista perfecta de número aleatorios.

Cualquier divisor de haz permite hacer un análisis semejante al anterior. Por ejemplo, una placa semitransparente, como puede ser un portaobjetos de vidrio sobre el que se ha depositado una fina capa de metal, divide el haz incidente en uno transmitido y uno reflejado (Fig. 1b). En este caso, la magnitud incierta es la dirección en la que va a emerger el fotón, que puede ser reflejado o transmitido. Un análisis similar se puede llevar a cabo también con el famoso experimento de la doble rendija (del cual comentaremos más adelante) o con el llamado espín de iones (en este caso la magnitud incierta será el espín y las veces del divisor de haz las haría un detector de Stern/Gerlach que divide el haz de partículas en dos direcciones diferentes una para cada valor del espín).

Una partícula de este tipo constituye lo que se conoce como un q-bit (abreviatura de bit cuántico). Por ejemplo, si nombramos como 0 la polarización vertical (a lo largo del eje del analizador) y como 1 la horizontal, podemos escribir, utilizando la notación de Dirac, la componente de polarización de la función de onda del fotón como:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

Donde α y β son las amplitudes de probabilidad para los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$, respectivamente. Según vimos arriba, las probabilidades correspondientes son: $\alpha^2 = \cos^2\theta$; $\beta^2 = 1 - \cos^2\theta$ ¹. Obsérvese que la dirección del eje del polarizador define lo que se conoce como base en la que se realiza la medición. En este caso la base, que llamaremos “base vertical” está compuesta por los vectores $|0\rangle$ y $|1\rangle$ y, desde luego, los valores de las amplitudes de probabilidad dependerán de la base que se emplee. Por ejemplo, si utilizamos una base que llamaremos “diagonal” (polarizador girado 45° respecto de la vertical) las amplitudes de probabilidad serán ahora diferentes. Una vez que se realiza una medición de la polarización se dice que la función de onda se proyecta sobre uno de los vectores base, o que colapsa en uno de los vectores base.

Esta aleatoriedad, que ha sido el gran motivo de debate entre físicos -como veremos a continuación- permite la realización de lo que se conoce como encriptación cuántica.

IV. ENCRIPCIÓN CUÁNTICA

Definamos que un fotón polarizado en la dirección vertical que corresponde con un 1, como se ilustra en la Fig. 2a (la dirección de polarización del fotón se indica por la flecha roja). Podremos detectarlo colocando un polarizador o vertical u horizontalmente, como se indica por las flechas negras, o sea midiendo con una base vertical. En este caso se dice que el estado de polarización del fotón es una auto-función en la base vertical. Si colocamos el eje del polarizador verticalmente y pasa la luz, sabemos que tenemos un 1 o si lo colocamos horizontalmente y no pasa también sabremos que tenemos un 1. (estamos suponiendo un polarizador de un solo canal, por simplicidad). O sea, si conocemos la dirección inicial y utilizamos la base adecuada, no existe incertidumbre

en la medición. Lo mismo pasa con un fotón polarizado horizontalmente y medido con una base vertical (Fig. 2b). Una explicación similar existe si tenemos fotones polarizados formando ángulos de 45° con la vertical y utilizamos una base diagonal para medirlos, como se muestra en la Fig. 2c,d). Supongamos que los fotones en a) y c) representan UNOS y en b) y d) representan CEROS. En el caso de Fig. 2e), el fotón tiene polarización vertical, pero está medido con una base diagonal, por lo que en este caso la función de onda no es una auto-función de la base, y la medición es incierta: el fotón se proyectará aleatoriamente como un UNO o un CERO. Como promedio, la mitad de las veces se obtendrá un UNO y la mitad un CERO. Veamos cómo funciona la encriptación cuántica. Supongamos una situación hipotética donde Alicia debe enviar una clave a Basilio.

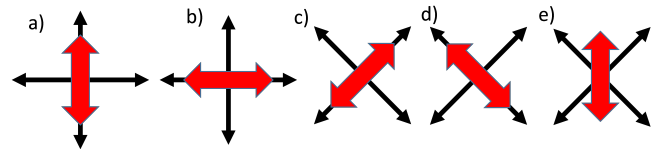


Figura 2. Se muestran fotones con diferentes direcciones de polarización medidos con diferentes bases. En (a-d), las polarizaciones son auto-funciones de las bases correspondientes, y la medición no presenta incertidumbre. En e), el fotón está polarizado verticalmente y es medido con una base diagonal, por lo que el resultado es incierto en el sentido que se explica en el texto.

PASO I. Alicia envía una cadena de CEROS y UNOS (de aquí saldrá la clave de la encriptación), para ello usa arbitrariamente una base u otra (rectilínea o diagonal) alternativamente. Por ejemplo, envía la lista que se muestra en el panel superior de la Fig. 3, en las bases que se indican en la línea de abajo, en amarillo, por lo que las polarizaciones son las que se muestran en rojo en la tercera línea. Por ejemplo, el primero de la lista es un CERO en una base diagonal y corresponde con un fotón polarizado diagonalmente, el segundo es un UNO en una base vertical, y así.

Esos mismos fotones los recibe Basilio, pero como él no sabe qué base usó Alicia, puede medirlos bien, o puede medirlos mal. Por ejemplo, los resultados de Basilio se muestran en la Fig. 3b). Él ha medido el primer fotón que tenían polarización diagonal, con un base diagonal y ha acertado en encontrar un CERO. Sin embargo, el segundo fotón que venía con polarización vertical lo ha medido con una base diagonal, y ha fallado, pues ha medido un 1 y en realidad era un CERO. No siempre erra cuando mide con la base equivocada porque el resultado es aleatorio, por ejemplo, en el fotón 12 él ha medido con una base vertical un fotón con polarización diagonal, y ha acertado (de “chiripa”) (para una lista grande, acertará la mitad de estos casos).

PASO II. Alicia y Basilio intercambian la lista de bases (no los resultados) a través de un canal público. Entonces desechan los bits medidos con bases distintas y se quedan con lo que se conoce como clave en bruto. Si todo estuvo bien, y los bits no se cambiaron en el camino (no ruido) y si no hubo ningún ataque de intruso, las dos cadenas de bits de Alicia y Basilio

¹En realidad, las amplitudes de probabilidad se presentan con mayor generalidad multiplicadas por una exponencial compleja que es el llamado término de fase. Por simplicidad, y porque no afecta el valor de la probabilidad, hemos omitido este factor aquí.

deben coincidir. Si no hubo ruido, pero hubo un ataque de intruso, que leyó la información y obtuvo los bits mediante bases aleatorias (como Basilio) y luego los reenvió a Basilio, entonces los bits que deberían coincidir no coinciden todos.

PASO III. Para saber si hubo intervención del espía, Alicia y Basilio intercambian públicamente una parte de los bits (los cuales después serán desechados). Si resultan iguales o muy parecidos, entonces continúan, si resultan diferentes abortan el proceso, pues perciben que hubo un ataque. Esto se conoce como autenticación. Esta clave podrán usarla entonces usar para cifrar los mensajes. Este protocolo fue creado por Bennett y Brassard en 1984 y se conoce como protocolo BB84.



Figura 3. Se representa el proceso de encriptación cuántica según el protocolo BB84. En el panel superior se muestra el primer paso: Alicia envía un grupo de bits codificados en la polarización de los fotones. Ella ha utilizado las bases que se indican en amarillo en la segunda línea y los fotones tienen la dirección de polarización que se indica en rojo en la tercera línea. En el panel central se muestra la recepción de Basilio. También aquí se pueden apreciar en amarillo las bases que utilizó. Los errores y los aciertos están marcados. Por último, luego de intercambiar las bases, eliminan las medidas con diferentes bases y se quedan con lo que se conoce como clave en bruto. Para saber si hubo alguna intrusión, intercambian algunos bits que luego se desecharán. Finalmente, tienen la clave para cifrar los mensajes.

Nótese que el protocolo se basa en el hecho de que los bits no pueden ser interceptados sin que el destinatario y el remitente se enteren. Esto es porque en el proceso de medición que pueda realizar el intruso, el bit puede modificarse. O sea, tratándose de encriptación cuántica, el intruso no puede suponer que va a espiar los datos que intercepta y que, luego de verlos, los enviará intactos al destinatario para que no se dé cuenta. En esto consiste la seguridad de la encriptación cuántica que a la larga se base en la aleatoriedad del resultado de las mediciones: extraño pero útil, se pudiera decir.

Otra de las ventajas de la superposición se aprecia en los actuales avances de la computación cuántica. Como tecnología está todavía en pañales, pero se está desarrollando muy rápidamente y parece ser muy prometedora para resolver problemas extremadamente difíciles con mucha rapidez. La computación cuántica también saca provecho de la

incertidumbre en los resultados de las mediciones. El llamado q-bit o bit cuántico, que es el elemento básico de este tipo de computación (como lo es el bit en la computación clásica), es simplemente una partícula, un fotón de luz, por ejemplo, que tiene alguna propiedad que no está definida, que es incierta. En el caso del fotón, como describimos arriba, esta propiedad suele ser la polarización que puede tener dos valores, horizontal o vertical, pero que en general está en una superposición de los dos valores de polarización diferentes. En un algoritmo cuántico, un conjunto de estos q-bits con propiedades inciertas sufre una serie de transformaciones hasta que, al final del cálculo, se realiza una medición y, si todo funcionó bien, se obtiene el resultado deseado. También se usan actualmente como q-bits, entre otros, circuitos superconductores o puntos cuánticos. Una de las ventajas de utilizar la FC en la computación es que permite, naturalmente, un cierto paralelismo, pues, al contrario de los algoritmos clásicos de computación, los algoritmos cuánticos procesan a la vez los dos estados del q-bit (en el caso de sistemas de varios q-bits, todos los estados en superposición).

El problema actual con la computación cuántica es que los q-bits son muy frágiles y la menor interacción no deseada hace que se produzca una medición antes de tiempo y se pierda el estado de superposición que los caracteriza y ya no sirven para continuar el cálculo. Por ello, es necesario evitar las interferencias externas y mantenerlos a muy bajas temperaturas. Como las primeras computadoras clásicas, las computadoras cuánticas de hoy ocupan espacios grandes y necesitan condiciones especiales mucho más de las que puede ofrecer una oficina cualquiera. Entre otras compañías, IBM, Intel y Google compiten con computadoras cuánticas que ya están rondando los 100 q-bits y que prometen en el futuro revolucionar muchas cosas, incluso de nuestra vida cotidiana. ¿Quién iba a decir que pudiera ser tan útil la incertidumbre?²

V. FOTONES ENTRELAZADOS. PARADOJA EPR Y GATO DE SCHRÖDINGER

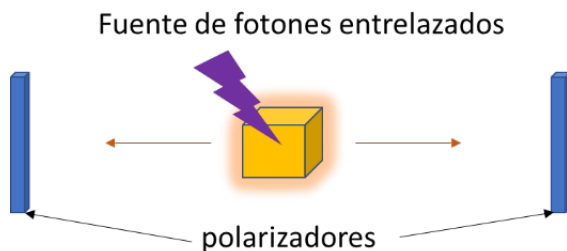


Figura 4. Un cristal no lineal es excitado con un láser muy intenso. En su interior, cada fotón del láser genera dos fotones entrelazados que tienen sus polarizaciones cruzadas.

Para obtener fotones entrelazados lo más común actualmente es usar lo que se conoce como conversión paramétrica espontánea a la baja (SPDC, del inglés spontaneous parametric down conversion) en la que un láser muy intenso se hace incidir sobre un cristal no lineal; dentro de este cristal ocurre que, de un fotón del láser incidente se pueden obtener

²Está avanzando tan rápido la computación cuántica que probablemente este último párrafo va a estar ya obsoleto cuando se publique este trabajo.

dos fotones con polarizaciones cruzadas³. Un esquema simplificado del proceso se muestra en la Fig. 4. Se dice que estos fotones están entrelazados (entangled es el término usado en inglés). De esta forma si los dos polarizadores están en la misma base (con los ejes verticales u horizontales) y uno mide 0 el otro mide 1 aunque los dos polarizadores estén en los extremos de la galaxia (siempre y cuando los fotones no hayan perdido la exclusividad del entrelazamiento entre ellos debido a la interacción con otros objetos). Nótese que el hecho de que los fotones tengan polarizaciones cruzadas, o sea, que sus polarizaciones estén relacionadas, no tiene nada de particular en sí mismo. Dos fragmentos de igual masa de una granada que ha explotado poseen velocidades contrarias, y eso no causa ningún estupor, es simplemente el resultado de una ley de conservación. La diferencia crucial entre un caso y el otro consiste en que cada uno de los fragmentos de la granada tenía bien definida su velocidad desde el momento de la explosión, independiente de que se le midiera o no. En cambio, los fotones entrelazados solo adquieren un estado de polarización una vez que se miden. Sólo cuando medimos la partícula A que se mueve hacia la izquierda, ella elige por la polarización en una dirección o en la otra aleatoriamente, pero entonces, instantáneamente, se define también la de la otra entrelazada que escogerá la dirección opuesta. Este es el misterio contenido en el entrelazamiento.

La función de onda de dos fotones cualesquiera se puede escribir como:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$$

El significado de esta expresión es el siguiente. Una vez que se realiza una medición, el sistema va a colapsar en uno de los cuatro estados $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ o $|11\rangle$ con probabilidad $1/4$. Esto quiere decir que si medimos el primer fotón y encontramos 0, el segundo fotón podrá resultar como 0 o 1, dependiendo de que el estado combinado sea el primero o el segundo de los cuatro anteriores. Evidentemente estos dos fotones no están entrelazados porque midiendo la polarización de uno, no se puede saber la del otro con exactitud. Consideremos entonces la función de onda siguiente:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$

Este sistema de dos fotones solo puede colapsar en dos estados combinados: $|01\rangle$ o $|10\rangle$. Si midiéramos el primer fotón y obtuviéramos un 0, esto indicaría que el sistema ha colapsado en el estado $|01\rangle$ por lo que el segundo fotón resultaría como un 1. Esta representa entonces la función de onda de dos fotones entrelazados como los que describimos arriba. Una función de onda como la siguiente, representaría dos fotones entrelazados de modo que ambos tienen la misma polarización.

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |11\rangle)$$

Estas propiedades de entrelazamiento, así como el principio de superposición, fueron rechazados en su momento por

Einstein (y otros científicos de la época) que sostenía que la realidad física no podía ser descrita de esa manera. Es curioso, porque como vimos anteriormente, el propio Einstein había sido uno de los iniciadores de la teoría cuántica, 30 años antes de que se introdujera el concepto de entrelazamiento. En 1935, junto a B. Podolsky y N. Rosen, llamó la atención sobre este problema y expresó su desacuerdo en un famoso artículo titulado “¿Puede ser considerada completa la descripción mecánico-cuántica de la realidad física?”⁴ [10]. Ellos sostenían que la interpretación cuántica suponía una paradoja que luego se conoció con el nombre de paradoja de Einstein-Podolsky-Rosen (EPR). Esta paradoja consistía precisamente en que, una vez de que se midiera una de dos partículas entrelazadas, la otra respondería instantáneamente y esto violaba el principio de relatividad pues, según este, nada podía propagarse a mayor velocidad que la luz. De hecho, Einstein llamó a este fenómeno “acción fantasmal a distancia”. También exponía la siguiente contradicción (llevada al ejemplo de la polarización de los fotones): si medíamos uno de los fotones con la base, digamos, vertical, este definía su polarización y el de su pareja entrelazada en esa base. Pero si al mismo tiempo medíamos el otro con una base diagonal, estaríamos definiendo la del otro y también la del primero en esa base. Entonces: tendríamos definidas las polarizaciones de cada fotón en las dos bases, lo que está prohibido por las mismas leyes de la FC. En este artículo se concluía que, debido a esto, la FC era incompleta y no podía describir adecuadamente la realidad. Apenas unos meses después Niels Bohr publicaba otro artículo con el mismo título refutando la suposición de Einstein [11]. Los debates entre Einstein y Bohr se prolongaron durante mucho tiempo, y Einstein no llegó a aceptar nunca el carácter probabilístico del resultado de las mediciones en la FC 5. Él solía plantearle a Bohr experimentos mentales (gedankenexperiment) que cuestionaban los fundamentos epistemológicos de la FC. Una descripción detallada de estos interesantes debates entre los dos grandes genios puede encontrarse en la ref. [12]. Una famosa paradoja en relación con el mismo tema fue propuesta en el mismo año 1935 por otro de los fundadores de la FC: Erwin Schrödinger. Se conoce como “la paradoja del gato de Schrödinger” y la describimos a continuación.

Un gato se encuentra encerrado en una cámara de acero junto con un dispositivo que contiene una cantidad muy pequeña de sustancia radiactiva. El estado de la sustancia radiactiva es tal que de acuerdo con los principios de la mecánica cuántica tiene una cierta probabilidad de desintegrarse emitiendo partículas radiactivas o de no desintegrarse. El dispositivo está hecho de manera tal que, si en la sustancia ocurre una desintegración y se produce una partícula radiactiva, un detector de partículas lo descubre y acciona un mecanismo que hace caer un martillo. Este martillo, al caer, rompe un frasco de ácido cianhídrico, que es un gas letal. Del experimento se puede inferir que si la sustancia radiactiva se desintegrara el gato morirá, pero si no,

³En algunos cristales el entrelazamiento consiste en que las polarizaciones son paralelas. Pero esto no cambia el sentido de los argumentos que se darán a continuación.

⁴En este artículo, Einstein mostró la paradoja usando las variables continuas posición y momento de dos partículas entrelazadas, no las polarizaciones de los fotones. La forma más simple de la paradoja que usamos aquí, expresada usando la polarización de los fotones fue introducida más tarde por David Bohm y se conoce a veces como la paradoja EPRB.

seguirá vivo. Se considera un tiempo tal que la posibilidad de que hubiera una emisión radiactiva de una partícula sería del 50 %. Como, de acuerdo con las propiedades de la mecánica cuántica, la sustancia radiactiva está a la vez desintegrada y no desintegrada mientras no se le mida, entonces el gato estará ¡al mismo tiempo vivo y muerto! en tanto no se abriera la cámara para observarlo (Schrödinger pedía perdón en su artículo por el experimento “anti-gatuno”). Pero uno supone que el gato no puede estar a la misma vez vivo o muerto, que el gato sabrá bien la condición que tiene. Esta paradoja del gato es habitualmente citada en las más importantes publicaciones sobre el tema. Schrödinger la construyó precisamente para demostrar lo absurdo que le resultaba el asunto.



Figura 5. Bohr y Einstein. Probablemente en alguna de sus famosas discusiones acerca de los fundamentos de la FC.

Einstein suponía que la FC estaba incompleta, y que no describía correctamente la realidad. El carácter probabilístico del resultado de la medición para una partícula en superposición entraba en contradicción con la teoría de la relatividad. Faltaba algo, un elemento de realidad, le llamó él, luego se utilizó el nombre de variables ocultas⁵. Las partículas debían tener la información que les “indicaba” que resultado tendría la medición, no se sabría cuáles eran esas variables, pero deberían existir. Aplicado a los fotones, un fotón debía saber que polarización adquirir luego de ser medido por un analizador con el eje en cualquier posición.

VI. EL TEOREMA DE BELL

A partir de ese año 1935, la situación estaba así: de una parte, la teoría de las variables ocultas locales soportada por Einstein y otros científicos que no aceptaban el carácter probabilístico del resultado de la medición. Por otra parte, estaba la FC tal y como era, sin ningún añadido. De esa otra parte estaban Bohr y Heisenberg (que había sido supervisado por Bohr en su tesis doctoral) que sostenían lo que se ha llamado “interpretación de Copenhague”, haciendo alusión a la ciudad donde radicaba Bohr. Y pasaron los años y el

problema parecía no tener solución. La FC, aun cuando era muy extraña, funcionaba perfectamente. Gracias a ella se desarrollaron, por ejemplo, los estudios de Física del Estado Sólido que culminaron con el desarrollo vertiginoso de la electrónica y la informática. Utilizando la FC Einstein predijo la existencia del láser que más adelante fue fabricado y que constituye uno de los grandes éxitos tecnológicos del siglo XX, y de toda la historia. Y aquel problema sobre los fundamentos pareció perder fuerza, e incluso importancia. Tal parecía que los resultados de los experimentos serían idénticos con una teoría de variables ocultas o sin ella, por lo que tal teoría no hacía ninguna falta. Algunos decían que era un asunto para tratar por los filósofos, no por los físicos, que era un tema inútil, hasta frívolo, etc. Se puso de moda la frase “cállate y calcula” que refleja en gran medida el sentimiento de esa época.

Pero la llama encendida con el artículo de Einstein de 1935 quedó en algunos y, 29 años después, en 1964, apareció otro artículo en una revista de poca categoría que ya no existe, llamada “Physics”, escrito por un irlandés de nombre John Stewart Bell, para el que las investigaciones en los fundamentos de la FC eran más bien una afición. En este artículo Bell proponía una forma experimental para probar si existían las variables ocultas o si, al contrario, la FC estaba completa [13]. Era eso que ocurre tan pocas veces en que un problema de la metafísica se traslada a la Física. Es el teorema o desigualdad de Bell. Hay quien dice que es el teorema más profundo de la ciencia.

El experimento en cuestión, ilustrado con polarización de fotones, y simplificado lo más posible, sería algo así como lo siguiente⁶. Tenemos una fuente de fotones entrelazados y dos observadores que tienen analizadores de polarización, preferiblemente de dos canales (en el que dos fotones con polarizaciones cruzadas emergen en direcciones diferentes). Para cada par de fotones los observadores harán una medición de la polarización de cada uno. Sólo que, aleatoriamente, cambiarán la dirección del eje de su analizador utilizando tres direcciones diferentes. Digamos que ellos van a poner indistintamente el eje del analizador vertical, o girado 60° o 120° con respecto a la dirección vertical. Los observadores no se han puesto de acuerdo, por lo que puede ser que uno coloque su analizador vertical y el otro a 60° , o bien que los dos los pongan verticales, y así. Lógicamente, si los dos colocan sus analizadores con el eje en la misma dirección, y los fotones están entrelazados como describimos arriba, encontrarán que las polarizaciones son cruzadas. Pero si los colocan con ángulos diferentes (o sea, miden con diferentes bases) uno del otro, podrán encontrar, eventualmente, en dependencia de los ángulos que elijan, que ambos tienen la misma polarización. Ellos van a anotar para cada fotón, si determinan la polarización paralela al eje o perpendicular (si el analizador es de un solo canal, el fotón que tiene polarización perpendicular no se detecta). Después de muchas medidas sobre las parejas de fotones, van a comparar los

⁵Hoy se denominan variables ocultas locales. Son aquellas que justificarían que no puede haber una respuesta instantánea entre las parejas de fotones entrelazados.

⁶Existen varias formulaciones del teorema de Bell. En particular, John F. Clauser, uno de los premiados con el Nobel realizó, junto con otros investigadores, modificaciones en la formulación del teorema que hicieron posible su realización experimental. Aquí he escogido una variante simplificada, que no es en realidad la que se ha utilizado en los experimentos pero que contiene el sentido de la propuesta de Bell.

resultados y calcular qué fracción del total de medidas resultó con mediciones de polarizaciones cruzadas, o sea, en qué fracción de las mediciones uno de los observadores encontró “paralelo” y el otro “perpendicular”.

El teorema demuestra que si los fotones tienen de antemano determinada la polarización que mostrarán para un dado ángulo del eje del polarizador (tienen variables ocultas locales), esto impone una restricción y la tal fracción tiene que ser mayor que un cierto valor. Sin embargo, para determinado rango de ángulos, se puede encontrar que, si, por el contrario, los fotones no tienen variables ocultas locales y responden de manera completamente aleatoria a la medición, la fracción resulta en un valor menor. En resumen, en el experimento hay que medir muchas parejas de fotones entrelazados y calcular la fracción del total de mediciones en que se encuentran polarizaciones cruzadas. Si este valor es menor que un cierto número (que se determina en función de los ángulos empleados) entonces no existen las variables ocultas y gana la FC. Esta es la desigualdad de Bell que si se cumple “ganan” las variables ocultas y si se viola “gana” la FC. O sea, en este experimento, la teoría de las variables ocultas locales y la FC producirían resultados diferentes, luego, el asunto perdía su matiz filosófico y se convertía en un problema de la Física práctica.

Esto que he tratado de describir en un párrafo, llevó mucho tiempo para concretarse. La realización de estos experimentos y otros relacionados es lo que ha sido premiado con el Nobel de Física de 2022 que se adjudicó el martes 4 de octubre de 2022 a Aspect, Clauser y Zeilinger.

Clauser fue el primero en realizar un experimento, en 1972, para probar la desigualdad de Bell [14]. Lo hizo usando fotones entrelazados emitidos en cascada por átomos de calcio. Ya en las conclusiones de este primer experimento se puede leer: “... no observamos evidencia de una desviación de la mecánica cuántica... Nosotros consideramos estos resultados como una fuerte evidencia en contra de las teorías de variables ocultas locales”. Ellos habían utilizado polarizadores de un solo canal, que quiere decir que sólo detectaban los fotones cuya polarización era paralela al eje del polarizador. Esto fue criticado como una fuente de error ya que la no detección de los fotones con polarización perpendicular al eje podía también ser debida a la baja eficiencia de los detectores.

Tocó a Aspect, 10 años después, realizar el experimento con analizadores de polarización de dos canales que detectaban tanto el fotón con polarización paralela como perpendicular al eje considerado [15]. Nuevamente el resultado fue a favor de la FC con mucha mejor precisión. Sin embargo, todavía quedaban escapatorias para la teoría de variables ocultas locales. La fuente y los detectores estaban posicionados desde antes de que se emitieran los fotones, esto quería decir que, en principio, pudiera ocurrir alguna comunicación sub-lumínica entre los detectores o entre los detectores y la fuente que permitiera “dar a conocer a los fotones” la información necesaria para ajustar sus polarizaciones al salir de la fuente. De esta forma se pudiera salvar la teoría de variables ocultas. Esta hipótesis era bastante extraña pero no tan extraña como

el resultado mismo que ofrecían los experimentos en relación con la aleatoriedad de los resultados de las mediciones. Fue el mismo Aspect quien, unos meses después, publicara los resultados de un experimento con analizadores que variaban en el tiempo [16]. En este caso utilizó un interruptor óptico que intercambiaba la dirección del haz muy rápidamente entre dos analizadores con lo que lograba que la dirección de los analizadores cambiara mientras los fotones ya estaban volando. De hecho, el tiempo de recorrido de los fotones en la instalación era de 40 ns, mientras que el cambio de los polarizadores se efectuaba en unos 10 ns. Aun así, todavía el experimento dejaba escapatorias, pues el cambio del eje de polarización de los analizadores, si bien realizado mientras las partículas entrelazadas estaban ya en vuelo, ocurría de manera periódica, lo cual lo hacía en cierto modo predecible. Era necesario que la dirección del eje de los analizadores cambiara estrictamente de modo aleatorio, para asegurar que no podía haber ninguna transmisión de información entre los fotones.

Este tipo de experimento tuvo que esperar los avances de la tecnología y fue realizado por el grupo de Anton Zeilinger 15 años después [17]; el esquema de la instalación usada se muestra en la Fig. 5. En este caso, usaron la conversión paramétrica a la baja para obtener los fotones entrelazados en vez de la cascada utilizada en experimentos anteriores. Los detectores fueron situados a 400 m uno de otro en las instalaciones de la Universidad de Innsbruck y el cambio de la dirección de los polarizadores se realizó a través de un modulador electro-óptico rápido controlado por una fuente de número aleatorios. Nuevamente el resultado favoreció a la FC.

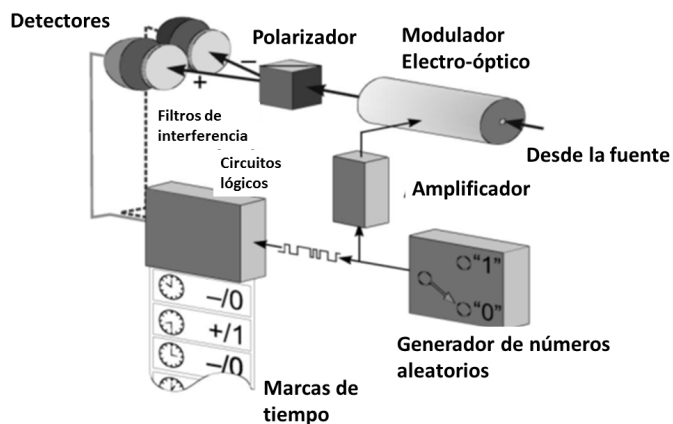


Figura 6. Una de las dos estaciones de detección en el experimento de Zeilinger de 1998. Nótese que un generador de números aleatorios dirige el modulador electro-óptico que cambia rápidamente el plano de polarización de la luz incidente. (La imagen está reproducida con permiso de [17]. Copyright 1998, American Physical Society).

No es ocioso comentar, en el sentido de ilustrar cómo funciona la ciencia, que incluyendo a Bell y a Clauser, muchos de los investigadores que trabajaron en experimentos relacionados con el teorema de Bell partían de la hipótesis de que Einstein estaba en lo cierto, y la FC estaba incompleta. Sin embargo, los obstinados resultados experimentales que obtuvieron, los llevaron a rechazar este supuesto inicial. De hecho, Clauser,

luego de la noticia del Nobel, ante la pregunta de qué le diría a Einstein en vista de sus resultados, expresó algo así como: “lo siento Albert, estabas equivocado, pero yo hice fuerza por ti”.

VII. TELETRANSPORTACIÓN

Se pudiera pensar que el entrelazamiento cuántico permitiría enviar información instantáneamente. Por ejemplo, supongamos que Alicia y Basilio se ponen de acuerdo y van a compartir una sucesión de partículas entrelazadas. Cada vez que Alicia mida su partícula, Basilio podrá medir la suya y encontrará, instantáneamente, un resultado que depende de lo que midió Alicia. Sin embargo, el resultado de la medida realizada por Alicia es completamente aleatorio, por lo que el valor obtenido por Basilio en la otra partícula, también lo será. Así, Alicia enviará (y Basilio recibirá) una lista de ceros y unos completamente aleatoria; y ocurre que una lista aleatoria de números no contiene información. En otras palabras, Alicia no puede decidir que va a enviar un uno, o un cero; lo que envíe serán aleatoriamente UNOS y CEROS. Por esto, la relatividad de Einstein queda a salvo. No hay transmisión de información instantáneamente.

Pero el entrelazamiento puede usarse para enviar información, si bien no a velocidades superiores a la de la luz. El procedimiento que se utiliza es llamado teletransportación cuántica. Obviando los detalles matemáticos, el método consiste en lo siguiente. Supongamos que cada uno de los dos personajes, tienen uno de los fotones de una pareja de fotones entrelazados a los cuales podemos llamar “2” y “3”, respectivamente. “2” está en poder de Alicia y “3” en poder de Basilio. Están entrelazados de forma tal que si uno tiene polarización vertical el otro debe tener polarización horizontal, y viceversa, por ejemplo. Hay un tercer fotón que es el que Alicia quiere teletransportar a Basilio al que llamaremos “1.” Lo primero que debe hacer Alicia es entrelazar el fotón “2” (que es el que está a su vez entrelazado con el de Basilio) con el fotón “1”. Luego debe hacer una medición sobre sus fotones (“1” y “2”) y mandarle a decir a Basilio el resultado, o sea, los tipos de polarización (vertical u horizontal) que obtuvo para sus dos fotones. Esta información la manda clásicamente (no se puede mandar de otra manera, pues ninguna información se puede enviar a mayor velocidad que la luz). Digamos que le manda un mensaje de whatsapp o un correo electrónico. Con esta información, Basilio sabrá qué operaciones debe hacer sobre su fotón para que se convierta en una copia idéntica de “1.” Luego de estas operaciones el fotón “1” ya no está en su estado inicial; ese estado lo tiene ahora el fotón de Basilio (“3”). Por eso se dice que se ha teletransportado el fotón “1” que estaba inicialmente en manos de Alicia hacia Basilio, que ahora no tiene precisamente el mismo fotón “1”, pero tiene uno exactamente igual. Es interesante en este proceso, que ni Alicia ni Basilio, saben cuál es el estado del fotón objeto de la teletransportación. También hay que notar que el estado del fotón “1” no se ha clonado, cosa que no permite hacer la FC. El fotón de Basilio es, luego de la teletransportación, una copia exacta del fotón “1” que tenía Alicia, pero este

ya no tiene las propiedades que tenía antes. La posibilidad de la teletransportación cuántica fue prevista teóricamente en 1993 y el primer reporte de su realización práctica ocurrió en diciembre de 1997 por el grupo de Zeilinger [18]. Teletransportaron la polarización de un único fotón usando el método descrito en el párrafo anterior. Como se describe en este artículo, el proceso de teletransportación se plantea matemáticamente de la siguiente manera. Supongamos que Alicia quiere teletransportar a Basilio el fotón con función de onda:

$$|\psi_1\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

Para ello, debe estar en posesión de otro fotón que a su vez está entrelazado con un fotón de Basilio, como explicamos antes, de modo que sus polarizaciones son contrarias. La función de onda de ellos será:

$$|\psi_{23}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + \beta|10\rangle)$$

Para teletransportar el primer fotón, Alicia debe entrelazar los dos fotones que posee (el que quiere teletransportar y el que tiene entrelazado con Basilio). Si el entrelazamiento que obtiene esta caracterizado por la función de onda:

$$|\psi_{12}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + \beta|10\rangle) \quad (1)$$

eso quiere decir que sus dos fotones también tienen polarizaciones contrarias. Pero como la polarización del fotón de Basilio debe ser, a su vez, contraria a la del fotón de Alicia, entonces, su fotón (el “3”) adquirirá la misma polarización (o sea, tendrá la misma función de onda) que el fotón inicial de Alicia:

$$|\psi_3\rangle = (|0\rangle + \beta|1\rangle)$$

De modo que se ha efectuado la teletransportación. En este caso particular, no haría falta ninguna comunicación de Alicia hacia Bob, sino que el fotón de Bob se convertiría en uno idéntico al fotón inicial de Alicia, automáticamente. Sin embargo, la comunicación es necesaria por lo siguiente. El entrelazamiento entre los fotones de Alicia, no tiene que responder a la función expresada en la ecuación (1), en realidad existen otras tres posibilidades (las cuatro funciones se conocen como estados de Bell):

$$|\psi_{12}\rangle = \frac{1}{2}(|01\rangle + \beta|10\rangle) \quad (2)$$

$$|\psi_{12}\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle - \beta|11\rangle) \quad (3)$$

$$|\psi_{12}\rangle = \frac{1}{2}(|01\rangle + \beta|10\rangle) \quad (4)$$

por lo que el entrelazamiento mostrado en la ecuación (1) ocurre sólo la cuarta parte de las veces. Alicia, entonces debe avisar que este tipo de entrelazamiento ocurrió, para que Bob esté seguro de que su fotón ahora es igual al que tenía Alicia. Si, en vez de esto, el entrelazamiento obtenido para los fotones de Alicia es del tipo indicado por alguna de las funciones (2-4), el fotón de Basilio no quedará automáticamente en el estado del fotón inicial. Aún en este caso, si Alicia envía la información (clásicamente) sobre el tipo de estado de Bell que encontró, Basilio sabrá qué operaciones realizar sobre su fotón, para que resulte en el estado deseado.

Otro capítulo de esta saga de teletransportaciones fue publicado en 2013 [19] por un grupo internacional de científicos de Dinamarca, España y Gran Bretaña. En este caso la teletransportación se produjo entre dos conjuntos A y B de miles de millones de átomos de cesio. Estos dos conjuntos se encontraban separados a una distancia de unos cincuenta centímetros. Para lograrlo utilizaron un haz de luz que primero se entrelazó con el sistema B y luego con el A con lo que se logró teletransportar las propiedades de A hacia B. O sea, el conjunto A de átomos dejó de tener sus propiedades iniciales y al mismo tiempo, propiedades exactamente iguales aparecieron en el conjunto B. En otras palabras, el conjunto B, distante, pasó a ser una copia exacta de A, al tiempo que A dejó de tener las propiedades que tenía. La distancia a la cual se ha podido obtener teletransportación cuántica ha ido escalando con el tiempo. En 2017 un grupo de investigadores chinos reportaron haber teletransportado la polarización de fotones entre un observatorio en el Tíbet y una estación orbital, a distancias que variaron entre 500 y 1400 km, dependiendo de la posición del satélite [20]. En este experimento, los autores aprovecharon el hecho de que parte del trayecto ocurre en una región de la atmósfera bastante enrarecida lo cual evita la dispersión de los fotones. Se espera que con este método se puedan establecer redes de computación cuántica con vistas a desarrollar el internet cuántico global.

Debo aclarar que la teletransportación solo ocurre para las partículas cuánticas, todavía no podemos emular a Harry Potter ni al hombre mosca, y tal vez nunca podamos. Aun así, los resultados de estos experimentos son muy sorprendentes.

VIII. LAS INTERPRETACIONES

El hecho de no haber podido conciliar los resultados de los experimentos con la teoría de las variables ocultas locales, nos devuelve a la situación que molestaba a Einstein. La existencia de esta situación, que algunos consideran inquietante, se pone de manifiesto más dramáticamente si suponemos la división espacial de un haz de fotones individuales. Veamos, por ejemplo, el famoso experimento de la interferencia de la doble rendija realizado con un flujo de fotones individuales. Ya se sabe que cada fotón está representado por una función de onda extendida en el espacio, y “pasa” a través de las dos rendijas. Por esto, un sólo fotón interfiere consigo mismo en la forma predicha por Thomas Young para la luz concebida como una onda clásica. Sin embargo, cuando realizamos una medición de la posición del fotón, su función de onda colapsa en un punto, o lo que es lo mismo, el fotón se mide como una partícula concentrada en el espacio. Si la medición se hace justo detrás de una de las rendijas (colocando un detector allí, por ejemplo) encontraremos que el fotón pasa por esa rendija la mitad de las veces. Lo mismo si medimos justo en la otra rendija. Pudiéramos pensar entonces que cada fotón no pasa por las dos rendijas sino por una sola, pero ¿cómo explicar entonces la formación de un patrón de interferencia? Porque si los fotones van pasando de uno en uno, y cada uno por una rendija, ¿con quién interfieren? De hecho, si no ponemos el detector detrás de la rendija sino ponemos, digamos, un dispositivo de carga acoplada (CCD, charge

coupled device, por sus siglas en inglés) en la región de la pantalla, se observará que cada fotón irá a parar también a un punto. Sin embargo, cuando hayan pasado muchos fotones, veremos que los lugares a donde fue a parar cada uno, son una representación del patrón de máximos y mínimos de interferencia que predice un comportamiento ondulatorio. O sea, como no hemos medido justo en las rendijas, ahora la función de onda no ha colapsado allí, sino que el electrón ha pasado a través de las dos rendijas y ha colapsado en la pantalla, donde hemos hecho la medición. Esto quiere decir que el hecho de que el fotón atravesara una rendija o las dos depende de cómo midamos. Einstein decía, ¿cómo es que la Luna no está allí cuando no la miramos? Heisenberg ha escrito, sorprendentemente: “En los experimentos sobre los acontecimientos atómicos, tenemos que vernoslos con cosas y hechos, con fenómenos que son tan perfectamente reales como los de la vida cotidiana. Pero los átomos o las mismas partículas elementales no son tan reales; constituyen un mundo de potencialidades o posibilidades más bien que uno de cosas o de hechos” [21]. Por su parte, y en la misma línea, Richard Feynman ha comentado: “...el electrón es una teoría, pero la teoría es tan buena, que casi podemos considerarlo real”.

Hoy se cree que la existencia del entrelazamiento es debida a que la FC no es local. Mario Bunge lo ha dicho de un modo bastante conciso: “...separación física implica separación espacial, lo contrario es falso. La teoría cuántica es entonces no local en este sentido peculiar, o como preferimos decir, es sistémica, en tanto no incorpora el principio clásico de que cosas extensamente separadas no pueden pertenecer al mismo sistema...” [22]. Ya que no se puede enviar información super-lumínica utilizando el entrelazamiento, no existe contradicción con la teoría de la relatividad.

Sobre la aleatoriedad del resultado de la medición, existen variadas interpretaciones. La más común y que se usa en la mayoría de los libros de texto (de hecho, la que he usado de alguna manera en mis descripciones anteriores) es la llamada interpretación de Copenhague. En esta interpretación, la FC consiste en un conjunto de operaciones y reglas, y la función de onda es algo que sirve para calcular y que se transforma predictivamente según la ecuación diferencial de Schrödinger, pero sólo mientras no se realice una medición. El resultado de la medición, en general, no es predecible. Esto es lo que se conoce como “el problema de la medición.” Lo más que puede saberse, es la probabilidad de obtener alguno de los diferentes resultados previstos por la ecuación. La función de onda no puede “observarse”, sólo es observable el resultado de la medición. Esto justifica la afirmación de Heisenberg de que el electrón no es real, si consideramos, como es usual, que lo real debe tener propiedades que son independientes de que sean medidas o no o del tipo de medición que se realice sobre ellas. Un electrón cuya posición depende de que se realice una medición, o un fotón cuya polarización depende de como coloquemos el polarizador, no contienen realidad. La interpretación de Copenhague suele dejar una cierta insatisfacción: ¿no se hizo en gran medida la ciencia para predecir? ¿es la ciencia solamente un conjunto de reglas de operación? ¿no hay nada conceptual en el fondo?.

Otra de las interpretaciones, es conocida como “universos múltiples”. Según esta interpretación, propuesta por Hugh Everett en 1957 [23], todos los posibles resultados de una medición sobre un sistema cuántico ocurren, sólo que en universos diferentes entre los cuales no hay intercambio de información. Esta interpretación, a pesar de parecer bastante exótica, es rigurosa y ha recibido el apoyo de eminentes físicos, probablemente porque no necesita del concepto de colapso de la función de onda. Sin embargo, contiene el problema de que es difícilmente falsable por medios experimentales (ya que no hay comunicación entre los universos) y muchos consideran que una hipótesis que no es falsable se encuentra fuera de la ciencia y es más bien un relato posible. Es interesante que en esta teoría cada resultado posee un pasado común a otros, pero da lugar a futuros diferentes, a infinitos futuros diferentes. Los partidarios de esta teoría se dividen entre los que creen que esos futuros son reales y los que no. Por lo que parece que el problema de la irrealdad se mantiene latente.

Existe una teoría de variables ocultas no locales (que por ser no locales, no entran en contradicción con los resultados de las pruebas del teorema de Bell) debida a David Bohm y publicada en dos artículos de 1952 [24, 25]. Esta teoría, tiene bases similares a una presentada anteriormente por Louis de Broglie (que había sido luego criticada por Pauli, y por el propio de Broglie); es conocida como teoría de de Broglie-Bohm o también como Mecánica Bohmiana. En ella, el movimiento de la partícula es guiado por una onda llamada onda piloto (precisamente en el sentido de que la guía, la pilotea). Así, por ejemplo, en el caso de la doble rendija que hemos descrito antes, se supone que la onda piloto pasa por las dos rendijas y que cada fotón atraviesa solo una, pero es guiado hacia las zonas donde la onda predice una máxima amplitud de la onda piloto. Es como si la onda piloto estableciera pistas para guiar el movimiento de las partículas.

La Mecánica Bohmiana provee resultados similares a la mecánica cuántica ortodoxa; no necesita la suposición del colapso de la función de onda, es determinista y no local. Sin embargo, no ha tenido gran presencia en la comunidad científica ni aparece como alternativa en los libros de texto. Hay quienes la consideran más complicada que la teoría estándar o que, al decir de Heisenberg [26] “no es una teoría contrapropuesta a la interpretación de Copenhague sino su repetición exacta en un lenguaje diferente”, lo cual otros consideran no justificado. En particular, Bell fue un gran defensor de esta teoría sobre la que comentó, refiriéndose al experimento de la doble rendija: “... ¿No está claro por la pequeñez del centelleo en la pantalla que tenemos que ver con una partícula? ¿Y no está claro, a partir de los patrones de difracción e interferencia, que el movimiento de la partícula está dirigido por una onda? De Broglie mostró en detalle cómo el movimiento de una partícula, que pasa a través de uno de los dos orificios de la pantalla, puede verse influido por las ondas que se propagan a través de ambos orificios. Tan influido que la partícula no va donde las ondas se anulan, sino que es atraída hacia donde cooperan. Esta idea me parece tan natural y sencilla, para resolver el dilema onda-partícula de una forma tan clara y ordinaria, que me resulta un gran misterio que haya sido tan generalmente ignorada ...” [27].

También hay hipótesis y especulaciones sobre la relación entre la conciencia y la FC; son muy variadas. Una de ellas supone que el colapso de la función ocurre por la acción de un observador consciente. Pero la mayoría considera que la medición es el resultado de la interacción de un sistema de pocos grados de libertad con un objeto macroscópico, donde el observador consciente no juega ningún papel importante. Un argumento interesante es que, si tomamos el universo entero como sistema, no nos quedaría ningún observador para efectuar las mediciones de la función de onda global, o en cambio, tendría que ser un observador fuera del mundo físico: ¿Dios? Existe también la hipótesis de que la conciencia es el resultado de procesos cuánticos en el cerebro. Y que la teletransportación es el origen de interacciones extrasensoriales, como las nunca fehacientemente demostradas telepatía, telequinesia o radiestesia. Muchas de estas ideas son interesantes y algunas tentadoras, pero no parecen tener sólidas evidencias científicas, al menos por el momento.

Por otra parte, algunos practicantes de las falsas ciencias se aprovechan de la complejidad de la FC para justificar determinados sistemas curativos como el toque cuántico, o la sanación cuántica. Pero ¡atención!, si bien la FC explica y predice muchas cosas que están fuera del sentido común, ello no quiere decir que explique cualquier supuesta cualidad extraña o sobrenatural.

IX. CONCLUSIONES

La FC ha dado un vuelco inimaginable al modo en que entendemos la realidad. Se sabe que la imposición de cualquier nuevo enfoque implica un tortuoso camino de comprobaciones, errores y debates, pero en el caso de la FC esto ha sido aún más agudo debido a lo exótico de algunos conceptos que evidentemente chocan con nuestros juicios habituales. Estos resultados extraños han sido aceptados luego de muchísimas pruebas y experimentos, y del hecho de que casi toda la tecnología actual, desde las computadoras hasta los láseres, tienen como sostén, de alguna manera, esta extraña teoría. De cualquier manera, casi todos los autores consideran que la FC es la más comprobada de todas las teorías de la Física. Lo que hemos analizado en este trabajo demuestra que la ciencia no rechaza las cosas extrañas como a veces se piensa: por el contrario, las incorpora y hasta les saca provecho. Rechaza, extraño o no, lo que no esté correctamente verificado. Una enseñanza que pudiera obtenerse de esta historia, y no sólo en cuestiones de física, es que no debíamos estar demasiado seguros de ninguna supuesta verdad absoluta; que lo que hoy parece una verdad como un templo, mañana puede descubrirse errado, o solo parcialmente cierto. Era inimaginable a principios del siglo XX la complejidad que aportaría la FC al pensamiento y no creo que ni siquiera un supuesto Julio Verne “cuántico” hubiera podido predecirla en una novela de ciencia ficción. El famoso biólogo y genetista J. B. S. Haldane lo ha dicho mejor: “mi propia sospecha es que el Universo no solo es más raro de lo que suponemos, sino más raro de lo que podemos suponer.” Así y todo, parece que la próxima revolución

científica será sobre estos temas.

Anexo: Algunos sitios educativos relacionados con la Física Cuántica.

<https://quantumatlas.umd.edu/entry/quantumstates>
<https://qplaylearn.com/about-us>
<https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/>
<http://www.quantica.fis.ufba.br/index.php>
<http://sites.science.oregonstate.edu/~mcintyre/ph425/spins/index.SPINS.OSP.html>
<https://qt.eu/about-quantum-flagship/the-quantum-flagship-community/quantum-community-network/>

REFERENCIAS

- [1] M. Planck, *Verhandl Dtsch Phys Ges.* **2**, 237 (1900).
- [2] A. Einstein, *Ann. Phys.* **322**, 132 (1905).
- [3] N. Bohr, *Lond. Edinb. Dublin Philos. Mag. J. Sci.* **26**, 1 (1913).
- [4] E. Rutherford, *Lond. Edinb. Dublin Philos. Mag. J. Sci.* **21**, 669 (1911).
- [5] W. Pauli, *Z. Für Phys.* **31**, 765 (1925).
- [6] D. Ter Haar, *The old quantum theory*, (Pergamon Press, New York, 1967).
- [7] W. Heisenberg, *Z. Für Phys.* **33**, 879 (1925).
- [8] E. Schrödinger, *Phys. Rev.* **28**, 1049 (1926).
- [9] L. D. Broglie, *Ann. Phys.* **10**, 22 (1925).
- [10] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).
- [11] N. Bohr, *Phys. Rev.* **48**, 696 (1935).
- [12] P.A. Schilpp, A. Einstein, Albert Einstein, philosopher-scientist, [1st ed.], (Library of Living Philosophers, Evanston, Ill., 1949).
- [13] J.S. Bell, *Phys. Phys. Fiz.* **1**, 195 (1964).
- [14] S.J. Freedman, J.F. Clauser, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 938 (1972).
- [15] A. Aspect, P. Grangier, G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91 (1982).
- [16] A. Aspect, J. Dalibard, G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1804 (1982).
- [17] G. Weihs, T. Jennewein, C. Simon, H. Weinfurter, A. Zeilinger, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5039 (1998).
- [18] D. Bouwmeester, J.-W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter, A. Zeilinger, *Nature*. **390**, 575 (1997).
- [19] H. Krauter, D. Salart, C.A. Muschik, J.M. Petersen, H. Shen, T. Fernholz, E.S. Polzik, *Nat. Phys.* **9**, 400 (2013).
- [20] J.-G. Ren, P. Xu, H.-L. Yong, L. Zhang, S.-K. Liao, J. Yin, W.-Y. Liu, W.-Q. Cai, M. Yang, L. Li, K.-X. Yang, X. Han, Y.-Q. Yao, J. Li, H.-Y. Wu, S. Wan, L. Liu, D.-Q. Liu, Y.-W. Kuang, Z.-P. He, P. Shang, C. Guo, R.-H. Zheng, K. Tian, Z.-C. Zhu, N.-L. Liu, C.-Y. Lu, R. Shu, Y.-A. Chen, C.-Z. Peng, J.-Y. Wang, J.-W. Pan, *Nature*. **549**, 70 (2017).
- [21] *FISICA E FILOSOFIA IN WERNER HEISENBERG*, Napoli, 2006.
- [22] M. Bunge, *Hidden Variables, Separability, and Realism*, in: M. Marion, R.S. Cohen (Eds.), *Qué. Stud. Philos. Sci. Part Log. Math. Phys. Hist. Sci. Essays Honor Hugues Leblanc*, Springer Netherlands, Dordrecht, 1995: pp. 217.
- [23] H. Everett, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 454 (1957) 454.
- [24] D. Bohm, *Phys. Rev.* **85**, 16(1952) 166.
- [25] D. Bohm, *Phys. Rev.* **85**, 180 (1952).
- [26] W. Heisenberg, *The development of the interpretation of the quantum theory*, (McGraw-Hill, New York, 1955) pp. 12. <https://plato.stanford.edu/archives/fall2021/entries/qm-bohm/>.
- [27] J.S. Bell, *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics: Collected Papers on Quantum Philosophy*, (Cambridge, 2004).

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.



UNA MIRADA AL EMPLEO DE LÁSERES EN UROLOGÍA

A LOOK AT THE USE OF LASERS IN UROLOGY

V. FAJER^{a†}, L. PONCE^b

a) Center of Technological Applications and Nuclear Development (CEADEN), 11300 Havana, Cuba; victorfajer@gmail.com[†]

b) Saint Petersburg Electrotechnical University, Professora Popova St 5, 197376 St. Petersburg, Russia; luisvponce@ontekollc.com

[†] autor para la correspondencia

Recibido 28/4/2022; Aceptado 20/11/2022

La cirugía láser acumula décadas de experiencia clínica, que han sido suficientes para mostrar su impacto en la medicina, particularmente en urología. Durante ese tiempo las aplicaciones quirúrgicas fueron cubiertas fundamentalmente por los láseres de Nd:YAG, favorecidos por su capacidad para acoplarse con fibras ópticas. Más recientemente, han irrumpido con fuerza láseres de estado sólido, que emiten en la zona media infrarroja del espectro en base a elementos como Ho, Tm y Er, cuya fuerte absorción por los tejidos o por el agua, combinada con una alta eficiencia y mayor robustez, los han convertido en los candidatos más prometedores para la urología. Aquí se presentan los láseres más usados en esta especialidad, con hincapié en los de holmio, y su amplia aplicación en urología hace más de 20 años, así como en los láseres de fibra óptica de tulio, por sus relevantes características e importancia estratégica.

Laser surgery has accumulated decades of clinical experience, showing its impact on medicine, particularly in the field of urology. During that time, laser surgical applications were dominated by Nd:YAG lasers, because of their ability to be coupled to optical fibers. More recently, solid state and fiber-based lasers have burst into the scene. These are capable of emitting in the mid-infrared range of the spectrum thanks to elements such as Ho, Tm and Er, whose strong absorption by tissues or water, combined with high efficiency and greater robustness, have made them the most promising candidates for urology. Here we present the most employed lasers in urology, emphasizing the holmium ones and their wide applications for more than 20 years, and the thulium fiber lasers, because of their outstanding characteristics and strategic importance.

PACS: Light-emitting devices (dispositivos emisores de luz), 85.60.-q.Jb; Optical methods (métodos ópticos), 83.85.-c; Fiber-optic instruments (instrumentos con fibra óptica), 07.60.Vg.

I. INTRODUCCIÓN

El funcionamiento de los departamentos de urología modernos y el alto nivel de servicio que brindan es posible, entre otras cosas, por el uso de modernas técnicas láser. Dependiendo de la longitud de onda, la absorción por el agua y la hemoglobina, y la profundidad de penetración de su radiación, los láseres se pueden utilizar para la coagulación, vaporización y extirpación. En muchos centros, una vez agotadas todas las posibilidades del tratamiento farmacológico, el láser se utiliza como tratamiento primario para los pacientes con oclusión benigna de próstata (BPO), con resultados terapéuticos mejores que los obtenidos mediante operaciones abiertas o endoscópicas. El uso de láseres en el tratamiento de urolitiasis, obstrucciones urinarias y tumores de vejiga ha hecho que el tratamiento de pacientes mayores con múltiples comorbilidades sea seguro, sin necesidad adicional de modificar el tratamiento farmacológico anticoagulante. Los procedimientos con láser son, además, menos invasivos, reducen el tiempo de hospitalización y permiten un tiempo de cateterismo vesicular más corto, a veces incluso eliminando por completo la necesidad de cateterismo. Estos procedimientos también se caracterizan por resultados más estables y un menor número de reoperaciones [1].

En las últimas dos décadas, las técnicas láser se han convertido en un método de tratamiento cada vez más popular para pacientes con hiperplasia prostática benigna, tumores de

vejiga, presencia de cálculos urinarios, estrechamiento del tracto urinario o lesiones de los genitales externos. El aumento de la accesibilidad al equipo apropiado, la curva de aprendizaje relativamente corta y los efectos terapéuticos prometedores han provocado un interés creciente en los métodos operatorios que emplean láseres. Son muchas las ventajas de los procedimientos con láser sobre las cirugías tradicionales. Primero, hay una mayor precisión y exactitud. En segundo lugar, los procedimientos con láser son menos invasivos, la energía del láser sella con calor los vasos sanguíneos y, como resultado, hay menos sangramiento, inflamación, dolor o cicatrices. En tercer lugar, los procedimientos con láser son una buena alternativa para los pacientes con alta comorbilidad que no son aptos para operaciones abiertas. Además, el tiempo de hospitalización y operación del láser puede ser más corto, y se pueden realizar más procedimientos en entornos ambulatorios. Por otro lado, también deben tenerse en cuenta algunas desventajas de las operaciones con láser. En primer lugar, no muchos médicos están capacitados para usar láseres. Además, el equipo láser es caro y difícil de manejar, y también debe recordarse que se deben seguir estrictas precauciones de seguridad en la sala de operaciones cuando se utilizan láseres [1–3].

En este trabajo se incluye una breve descripción de la interacción del haz láser con los tejidos, que se complementa con las características del haz del láser de los diferentes tipos de láseres que influyen de forma significativa en la interacción de la radiación. En la descripción específica de los láseres, se

refuerza la explicación de la interacción con tejidos biológicos [1-4].

Existe una variedad de láseres que se han utilizado y mantienen su empleo en urología, entre ellos se encuentran los láseres de CO₂, de Nd: YAG, los de holmio, los de tulio y, más recientemente, los conocidos como de fibra óptica con distintos dopantes que constituyen un salto tecnológico. Se hará hincapié en la descripción de los láseres de holmio y su amplia aplicación en urología hace más de 20 años y se abordarán también con cierta profundidad los láseres de fibra óptica de tulio por su importancia estratégica. En ambos casos, se incluyen los esquemas de bombeo de los respectivos láseres. Se describirán otros láseres que se han utilizado y utilizan en urología [5-7].

II. INTERACCIÓN ENTRE EL HAZ LÁSER Y EL TEJIDO

La interacción entre el haz láser y el tejido depende de fenómenos físicos, como la reflexión, la dispersión y la absorción. Obviamente, se refleja una parte de la radiación láser que es inútil para fines quirúrgicos. Además, la luz reflejada puede causar daños térmicos no deseados en las áreas circundantes. Desde una perspectiva médica, el fenómeno más importante es la absorción de la luz láser por el cromóforo, que consiste en una región molecular del tejido donde la diferencia de energía entre dos orbitales moleculares cae dentro del rango del espectro visible. En el cromóforo, la luz láser se convierte en energía térmica. La luz es absorbida en los tejidos por la hemoglobina, el agua o la melanina. Dependiendo de la temperatura a la que se caliente el tejido, el mismo sufre coagulación o vaporización. En el caso de un coeficiente de absorción de tejido bajo, el haz láser penetra más profundamente, mientras que un coeficiente de absorción alto da como resultado una penetración poco profunda. Sin embargo, el efecto no solo depende del medio. La longitud de onda del láser también juega un papel importante. Para los láseres que emiten longitudes de onda más cortas, una mayor cantidad de energía se convierte en calor [6].

Otras características de significativa influencia en la interacción láser-tejido son el perfil del haz luminoso, la energía del pulso y la tasa de repetición del pulso láser.

III. LÁSERES DE HOLMIO

El láser Ho: YAG trabaja a la longitud de onda de 2100 nm, empleando agua como cromóforo. Se ha introducido en múltiples técnicas quirúrgicas, que incluyen ablación, resección y extirpación. La extirpación (HoLEP) es un campo de aplicación para el láser Ho: YAG en BPO (oclusión benigna de la próstata). Usando la liberación de energía pulsada, el láser se puede usar como un cincel para extirpar tejido prostático, agrandado en la capa de la pseudocápsula quirúrgica. En general, la extirpación es imitada por todos los referidos procedimientos recientemente introducidos y modificado de acuerdo con las propiedades del láser en particular. La extirpación con láser Ho: YAG ha demostrado ser eficaz y segura en múltiples ensayos y representa el método de

referencia para todos los procedimientos de extirpación con láser recientemente introducidos [8-17].

En la Fig. 1 se muestra el esquema de niveles de energía que indican la posibilidad de bombeo a la longitud de onda de 1940 nm y la emisión de la radiación del láser de Ho a 2050 nm.

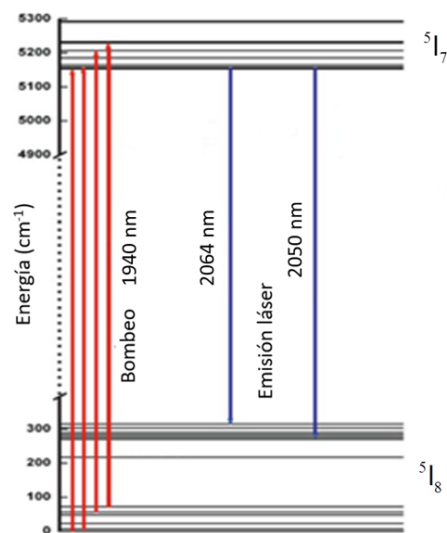


Figura 1. Esquema de los niveles de energía de interés para el bombeo del láser de Ho:YAG.

El láser Ho:YAG es el más utilizado en cirugía urológica. Está disponible en versiones de baja potencia (20 W) y alta potencia (60-100W) para su uso en láser litotricia y tratamiento de la BPO, respectivamente. Generalmente, dispone de un intervalo de duración de pulso de 250 a 350 μ s. El coeficiente de absorción óptica para el agua a 2100 nm es de aproximadamente 40 cm⁻¹, por lo que es fuertemente absorbido por el agua en el tejido superficial. Esta propiedad permite que el láser realice un corte superficial. La disipación de calor con un láser de alta potencia puede provocar la vaporización del tejido. La zona de lesión térmica asociada con la ablación con láser varía de 0.5 a 1 mm y garantiza una hemostasia adecuada durante la ablación (o sea, la constancia relativa de los parámetros biológicos normales) incluso para vasos con un diámetro superior a 1 mm. La duración del pulso del láser Ho:YAG es lo suficientemente corta como para que la difusión de la energía térmica de los láseres de baja potencia sea mínima (se estima que el tiempo de relajación térmica para los tejidos blandos es de 310 ms). También se transmite fácilmente de manera eficiente por fibras de sílice que varían de 150 a 940 μ m de diámetro, una característica que permite su uso en procedimientos endoscópicos.

En la Fig. 2 se muestra el esquema de bombeo del láser de Ho con un láser de Tm de estado sólido que emite a la longitud de onda de 1.9 μ m para obtener la emisión del láser de Ho a 2.5 μ m.

La ablación de holmio ha disminuido en popularidad, pero el concepto sigue siendo válido y ha sido adoptado por tecnologías más recientes, incluida la fotovaporización de la próstata (PVP) con láseres de tulio y de holmio de mayor potencia (100 y 120 W). La siguiente iteración de la aplicación

del láser de holmio en BPO fue HoLRP, desarrollada para reducir los tiempos operativos. HoLRP se basa en el uso de un láser Ho:YAG para cortar piezas de tejido prostático, pieza por pieza, hasta exponer la cápsula quirúrgica en lugar de extirpar capas de tejido de medio milímetro.

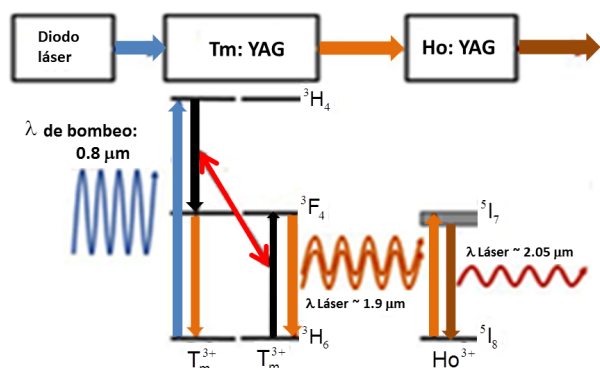


Figura 2. Esquema de bombeo para un láser de Ho bombeado con láser de Tm.

El láser de holmio es un compromiso entre el láser ultrapreciso de erbio:YAG, que utiliza una longitud de onda de 2940 nm para la ablación e incisión de tejidos y el calentamiento volumétrico profundo proporcionado por el láser de Nd:YAG, que utiliza una longitud de onda de 1064 nm para la coagulación térmica y hemostasia [9]. El láser de holmio se puede usar para una variedad de aplicaciones, lo cual es deseable para los urólogos que buscan un solo sistema láser para tratar diversas indicaciones, como cálculos urinarios y BPO. En segundo lugar, la longitud de onda del láser permite conducir el haz a través de fibras ópticas convencionales de sílice con bajo contenido de hidroxilo (OH). Las fibras de sílice son robustas con propiedades térmicas, mecánicas y químicas deseables, lo que permite la transmisión de alta potencia láser para la ablación de cálculos, radios de curvatura cortos para usar dentro del canal de trabajo de ureteroscopios flexibles, esterilización para uso médico y resistencia a la corrosión en el fluido medio ambiente del tracto urinario. La sílice también es un material biocompatible, haciéndolo seguro para uso biomédico. Además, las fibras de sílice se producen en masa para su uso en telecomunicaciones y aplicaciones industriales, por lo que resulta asequible como un sistema desechable, de un solo uso, de administración médica de fibra óptica.

Otro aspecto a considerar consiste en que el esquema de bombeo de la lámpara flash para el láser holmio:YAG es económico en comparación con otros sistemas láser bombeados por diodos, lo que hace que el láser sea rentable para la cirugía. Aunque el costo del capital inicial de un láser de holmio de baja potencia es relativamente bajo para los estándares de dispositivos médicos, la necesidad de una fuente de alimentación de alto voltaje, un sistema interno de enfriamiento de agua, lámparas de repuesto y el amplio uso de componentes ópticas hace que el aparato láser sea bastante complejo y potencialmente costoso de mantener durante su vida útil. La tecnología láser de holmio ha estado disponible durante más de dos décadas, pero las mejoras modestas en la tecnología han tomado dos direcciones diferentes. En

una dirección, se han desarrollado módulos láser de mesa de holmio más pequeños, de menor potencia (20 W), más compactos, dedicados específicamente a la litotricia láser para ahorrar espacio en la sala de operaciones y para la integración directa con otros componentes del ureteroscopia, como monitores, iluminación y sistemas de imágenes, en una sola consola. En la otra dirección, los láseres de holmio más grandes, más potentes y más caros con potencias de salida de láser progresivamente más altas (desde 30 W originalmente y ahora hasta 120 W) se han desarrollado gradualmente, principalmente para su uso en la extirpación láser de la próstata durante el tratamiento de BPO [18–20].

IV. LÁSERES DE FIBRA, LÁSERES DE FIBRA DE TULIO

La principal ventaja de los láseres de fibra es, en general, su capacidad de entregar una salida de alta potencia desde un núcleo de fibra pequeño, lo que resulta en alta intensidad o brillo. Los láseres de fibra más comunes están hechos de fibras de sílice dopadas con iterbio, erbio y tulio, que emiten a longitudes de onda de 1075 nm, 1550 nm y 1940 nm, respectivamente [21–23].

Las longitudes de onda del láser de fibra infrarroja media son especialmente útiles para aplicaciones de ablación con láser en cirugía como la litotricia, ya que estas longitudes de onda apuntan a los picos de absorción de agua en el tejido, proporcionando así un aumento rápido de temperatura dentro de una profundidad de tejido pequeña, suficiente para una ablación de tejido eficiente y precisa. Los estudios experimentales iniciales de los láseres de fibra infrarroja media en cirugía se limitaron a los láseres de muy baja potencia (solo unos pocos vatios) que emiten en modo de onda continua o pulso corto (nanosegundos) a longitudes de onda cercanas a 1940 nm y 2940 nm de absorción de agua, picos de ablación y coagulación de tejidos [24–26].

La salida de potencia limitada y el modo de operación de onda continua fueron sub-óptimos para la mayoría de las aplicaciones quirúrgicas porque las intensidades altas y la operación pulsada son necesarias para el confinamiento térmico de la energía y la ablación de tejido eficiente. Además, el uso de una longitud de onda de 2940 nm estaba limitado por la incapacidad de usar fibras estándares de sílice con bajo contenido de OH, como también es el caso en los láseres de erbio:YAG.

Sin embargo, se han hecho progresos considerables en el desarrollo de láseres de fibra de tulio de alta potencia (TFL), que operan cerca de un pico de absorción de agua en el tejido a 1940 nm. Esta longitud de onda se puede administrar a través de fibras de sílice estándar, similares a las que se usan actualmente con láser de holmio:YAG ($\lambda = 2120$ nm) y tulio:YAG ($\lambda = 2010$ nm) en urología. El primer uso experimental de TFL de alta potencia en urología se realizó en la ablación de tejidos blandos y cálculos urinarios a 40 W y 110 W [6]. Desde entonces han aparecido estudios de TFL para aplicaciones de hígado, cerebro, piel, dental, endobronquial y litotricia. TFL es una de las nuevas tecnologías láser más prometedoras para la litotricia y podría ofrecer varias ventajas

potenciales en comparación con el láser de holmio, estándar de oro actual.

V. LÁSER DE FIBRA DE TULIO. IMPORTANCIA DE LA LONGITUD DE ONDA DEL LÁSER

Las longitudes de onda comunes del láser de infrarrojo medio incluyen el láser de fibra de tulio a 1908 y 1940 nm, tulio:itrio-aluminio-granate (YAG) a 2010 nm, holmio:YAG a 2100 nm y erbio:YAG a 2940 nm [6].

El láser de fibra de tulio es uno de los láseres de fibra con más utilización y perspectivas en aplicaciones urológicas debido a la longitud de onda del haz emitido. En la Fig. 3 se muestra de forma comparativa la absorción de la radiación atendiendo a la longitud de onda.

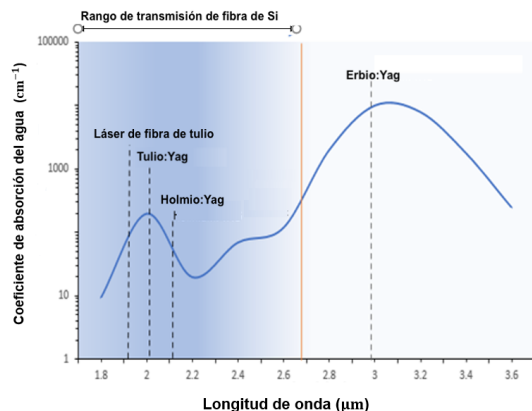


Figura 3. Coeficiente de absorción de agua en función de la longitud de onda del láser en el espectro infrarrojo medio.

El TFL funciona con longitudes de onda de emisión primarias de 1908 nm y 1940 nm, que coinciden más estrechamente con un pico de absorción de agua que el correspondiente al láser de holmio a 2100 nm. Se cree que la absorción de energía infrarroja por el agua tiene un papel importante en la ablación de los cálculos, además de la absorción directa de la energía láser por el material de los cálculos, ya que los espectros de absorción del infrarrojo cercano por los cálculos secos son similares para diferentes composiciones. El coeficiente de absorción de agua es $\mu_a=120 \text{ cm}^{-1}$ para el TFL, $\mu_a=60 \text{ cm}^{-1}$ para el tulio:YAG, y $\mu_a=25 \text{ cm}^{-1}$ para el holmio:YAG. Estos valores dan como resultado una absorción de energía TFL que es el doble que la de los láseres de tulio:YAG y de cuatro a cinco veces mayor que los láseres de holmio:YAG.

Esta mayor absorción de energía del agua para TFL se traduce directamente en umbrales de ablación de tejido más bajos. Se ha informado que los umbrales de ablación de TFL para las composiciones de cálculos más comunes que se encuentran en la clínica (el monohidrato de oxalato de calcio y el ácido úrico), son cuatro veces más bajos para TFL que para el holmio:YAG. Por lo tanto, se puede usar una energía de pulso TFL más baja para una ablación de piedra equivalente, o se puede usar energía de pulso equivalente para una ablación de piedra más eficiente. Esta eficiencia mejorada es notable porque la energía y/o potencia del láser de holmio no puede aumentarse para

compensar su eficiencia reducida sin traducirse también en una mayor retropropulsión de cálculos, lo que puede hacer que el urólogo pierda el tiempo persiguiendo el cálculo a través del tracto urinario y las complicaciones asociadas.

Por ejemplo, el daño inducido por TFL en las cestas de piedra de nitinol que se usan con frecuencia durante los procedimientos de litotricia con láser ureteroscópico, se ha informado a distancias de trabajo de hasta 1.0 mm desde la punta de la fibra, mientras que el daño inducido por láser de holmio se ha observado a distancias de trabajo de hasta 5 mm, lo que significa que el TFL tiene un mejor perfil de seguridad de cuatro a cinco veces mayor que los láseres de holmio:YAG [27,28].

VI. PERFIL DEL HAZ LUMINOSO

La principal ventaja de los láseres de fibra es la capacidad de lograr alta intensidad o alto brillo porque la luz se origina dentro del núcleo pequeño (18-25 μm) de la fibra óptica de sílice dopada con tulio, cuyo haz es aproximadamente 100 veces más pequeño en diámetro que el correspondiente a un láser de estado sólido holmio:YAG. Esta propiedad del TFL proporciona un perfil de haz espacial gaussiano casi mono-modal, que es más uniforme y simétrico que el haz multi-modal producido típicamente por el láser holmio:YAG. El perfil de haz multi-modo del láser de holmio prohíbe el acoplamiento de alta potencia láser en fibras de núcleo pequeño (<200 μm) sin riesgo de sobrellenado del núcleo de fibra de entrada y lanzamiento de energía en el revestimiento de la fibra, lo que puede dañar directamente el extremo próximo a la fibra. Los haces de los láseres de holmio generalmente poseen diámetros grandes (275-500 μm), que son sub-óptimos para la mayor flexibilidad y flujo de irrigación necesarios para los procedimientos complejos de ureteroscopia.

Un estudio in vitro sobre la litotricia de holmio:YAG, con ajustes de láseres iguales de holmio:YAG, merece especial atención. El tamaño más pequeño de fragmentos de piedra se ha logrado con la fibra más pequeña disponible (núcleo de 272 μm diámetro). Esta observación es válida tanto para cálculos de monohidrato de oxalato (COM) y ácido úrico (UA) evaluado para todos los niveles de energía de pulso evaluados (0.5, 1.0 y 1.5 J). Una explicación puede ser que las fibras más pequeñas permiten la irradiación láser de un área más pequeña en la superficie de la piedra, disminuyendo así la probabilidad de que fragmentos grandes se desprendan de piedras iniciales. Teniendo en cuenta la observación anterior, un tamaño de fibra tan pequeño como sea posible, sería deseable para la litotricia con láser. Esta es precisamente una limitación de los láseres holmio:YAG; los generadores solo pueden aceptar fibras de forma segura con un diámetro de núcleo $\geq 200 \mu\text{m}$. Comparativamente, el láser de fibra de tulio, genera una forma mucho más uniforme y enfocada del haz láser, que puede transmitirse a las fibras con diámetros de núcleo más pequeños (50-150) μm [29-32].

VII. ENERGÍA DEL PULSO

Una limitación conocida durante el uso de fibras más pequeñas es el riesgo de degradación de la punta de la fibra a altos niveles de energía de pulso. Cuando el diámetro del núcleo se divide entre dos, la densidad de energía se incrementa en cuatro. Por lo tanto, como regla, la energía del pulso debe dividirse por cuatro cuando el diámetro del núcleo de fibra se divide por dos. Mayor duración del pulso también puede contribuir a la prevención de la degradación de la punta de la fibra.

VIII. TASA DE REPETICIÓN DEL PULSO LÁSER

El TFL con bombeo de diodo permite una mayor flexibilidad en la elección de los parámetros de funcionamiento del láser que los láseres de estado sólido bombeados por lámparas de flash convencionales. Por ejemplo, el láser de holmio:YAG de baja potencia se limita al funcionamiento a frecuencias de pulso <30 Hz debido al sobrecalentamiento potencial y al daño térmico catastrófico de la barra láser. La gran mayoría de la luz blanca de la lámpara de flash utilizada para bombear el cristal láser no contribuye al funcionamiento del láser, sino que se desperdicia en forma de calor, lo que requiere sistemas de enfriamiento de agua voluminosos y costosos para evitar daños inducidos térmicamente en la barra láser. Como resultado de este esquema de bombeo, la eficiencia energética de los láseres de holmio:YAG es típicamente <1-2% (con un 98-99% de energía desperdiciada como calor). Aunque láseres de holmio:YAG de alta potencia son capaces de funcionar en régimen de pulsos, ahora están disponibles a frecuencias de hasta 80 Hz, la mayor potencia se genera mediante la implementación y el empaquetado de múltiples barras y cavidades láser dentro del sistema láser con una complejidad y gasto adicionales sustanciales, en lugar de un gran avance en la tecnología del holmio láser. Por el contrario, el TFL bombeado por diodos es eficiente, con una eficiencia energética de ~ 12%, lo que permite la refrigeración por aire y el funcionamiento del láser a frecuencias de pulso de hasta 2000 Hz. Es probable que tales altas frecuencias de pulso sean innecesarias, y los estudios de litotricia TFL han reportado frecuencias de pulso de hasta 500 Hz [28, 29].

IX. CONCLUSIONES

El láser de holmio:itrio-aluminio-granate (YAG) es actualmente el estándar de oro para la litotricia láser durante la ureteroscopia flexible, porque se puede utilizar para tratar eficazmente todas las composiciones de cálculos. También se usa en la oclusión benigna de próstata con resultados satisfactorios. Su precio en el mercado resulta adecuado si lo comparamos con otros equipos médicos.

Por su parte, el láser de fibra de tulio (TFL) es la alternativa más prometedora del holmio para la litotricia debido al uso de una longitud de onda TFL más adecuada, fibras más pequeñas y el potencial para usar un sistema láser más pequeño y menos costoso. Sin embargo, se necesitan estudios clínicos adicionales para evaluar esta nueva tecnología.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos el valioso apoyo brindado por el M.C. Omar Morales y la dirección del CEADEN para la realización de este trabajo.

REFERENCIAS

- [1] L. Dolowy, W. Krajewski, J. Dembowski and A. Kolodziej. *Cent. Europ. J. Urol.* **68**, 175 (2015).
- [2] S. Korn, N. Hübner, C. Seitz, S. Shariat and H. Fajkovic, *Photochem & Photobiol. Sci* **18**, 295 (2019).
- [3] Iremashvili V. and Marcovich R, (Lasers in dermatology and medicine: Laser applications in urology. Springer, 2018).
- [4] P. Rice and B. Somani, *Res. Rep. Urol.* **13**, 519 (2021).
- [5] Giuseppe Morgia and Giorgio Ivan Russo, (Lower Urinary Tract Symptoms and Benign Prostatic Hyperplasia, Research to Bedside, 2018) pp. 257.
- [6] N. M. Fried and P. B. Irby, *Nat. Rev. Urol.* **15**, 563 (2018).
- [7] S. P. Dretler, G. Watson, J. A. Parrish and S. Murray, *J. Urol.* **137**, 386 (1987).
- [8] J. P. Johnson, M. C. Oz and R. S. Chuck, *Surg. Endosc.* **3**, 7 (1989).
- [9] M. L. Spindel et al., *Lasers Surg. Med.* **12**, 482 (1992).
- [10] D. Bagley and M. Erhard, *Tech. Urol.* **1**, 25 (1995).
- [11] B. R. Matlaga, *J. Urol.* **181**, 2152 (2009).
- [12] C. D. Scales et al., *J. Urol.* **186**, 146 (2011).
- [13] K. F. Chan et al., *Lasers Surg. Med.* **25**, 22 (1999).
- [14] A. Roggan, U. Bindig, W. Wäsche and F. Zgoda, *Action mechanisms of laser radiation in biological tissues* (Springer, Berlín, 2003) pp. 73.
- [15] H. H. Razvi, S. S. Chun, J. D. Denstedt and J. L. Sales, *J. Endourol.* **9**, 387 (1995).
- [16] J. A. Harrington, *Infrared Fibers and their Applications* (SPIE, Bellingham, 2004).
- [17] K. Scholle, S. Lamrini, P. Koopmann and P. Fuhrber, *Frontiers in guided wave optics and optoelectronics* (IntechOpen, 2010) pp. 471.
- [18] C. A. Dauw et al., *J. Endourol.* **29**, (2015).
- [19] W. R. Molina et al. *J. Endourol.* **29**, 235 (2015).
- [20] S. Buttice et al. *J. Endourol.* **30**, 574 (2016).
- [21] Fried, N. M. *Lasers Surg. Med.* **36**, 52 (2005).
- [22] N. M. Fried and K. E. Murray, *Endourol.* **19**, 25 (2005).
- [23] N. M. Fried, *Lasers Surg. Med.* **37**, 53 (2005).
- [24] G. M. Hale and R. M. Querry, *Appl. Opt.* **12**, 555 (1973).
- [25] E. D. Jansen, T. G. van Leeuwen, M. Motamedi, C. Borst, and A. J. Welch, *Lasers Surg. Med.* **14**, 258 (1994).
- [26] B. I. Lange, T. Brendel and G. Huttmann, *Appl. Opt.* **41**, 5797 (2002).
- [27] J. Cordes, B. Lange, D. Jocham and J. Kausch, *Endourol.* **25**, 1359 (2011).
- [28] J. Cordes, F. Nguyen, B. Lange, R. Brinkmann and D. Jocham, *Adv. Urol.*, 1 (2013).
- [29] N. J. Scott, C. M. Cilip, and N. M. Fried, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **15**, 435 (2009).
- [30] R. L. Blackmon, P. B. Irby and N. M. Fried, *Lasers Surg. Med.* **42**, 45 (2010).

[31] R. L. Blackmon et al., Opt. Eng. **54**, 011004 (2015).

IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. **20**, 138 (2014).

[32] L. A. Hardy, C. R. Wilson, P. B. Irby and N. M. Fried,

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 FIRST RESULTS OF OBSERVATIONS OF THE JOINT RUSSIAN-CUBAN OBSERVATORY

LOS PRIMEROS RESULTADOS DE LAS OBSERVACIONES DEL OBSERVATORIO CONJUNTO DE RUSIA Y CUBA

S. NAROENKOV^{a†}, M. NALIVKIN^a, I. SAVANOV^a, A. ALONSO DIAZ^b, F. GONZÁLEZ^b, S. DERRY^b, N. PAULA-ACOSTA^b

a) Institute of Astronomy, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia; snaroen-kov@inasan.ru.[†]

b) Institute of Geophysics and Astronomy, Havana, Cuba.

† corresponding author

Recibido 12/5/2022; Aceptado 1/12/2022

In this paper we present the first research results of the optical station at the Russian-Cuban observatory. The observatory includes two stations – optical and geodynamical, created by The Institute of Geophysics and Astronomy of Cuba in collaboration with The Institute of Astronomy of The Russian Academy of Sciences and the Institute of Applied Mathematics of The Russian Academy of Sciences. The main instrument of the optical station is a 20-cm wide-field robotic telescope with a CCD camera equipped with the wheel of photometric filters. We present the first photometric researches of active stars V410 Tau, FR Cnc and FK Com obtained in the late 2021 and early 2022.

En este artículo presentamos información sobre los primeros resultados de las investigaciones sobre la estación óptica del observatorio Ruso-Cubano. El observatorio consta de dos estaciones, óptica y geodinámica, creadas por el Instituto de Geofísica y Astronomía de Cuba en colaboración con el Instituto de Astronomía de la Academia de Ciencias de Rusia y el Instituto de Matemáticas Aplicadas de la Academia de Ciencias de Rusia. El instrumento principal de la estación óptica es un telescopio robótico de campo ancho de 20 cm con cámara CCD y una rueda de filtros fotométricos. A finales de 2021 y principios de 2022 se realizaron las primeras investigaciones fotométricas de las estrellas activas V410 Tau, FR Cnc y FK Com.

PACS: Telescopes (telescopios), 95.55.-n; Optical instruments (instrumentos ópticos), 07.60.j; Astronomical observations (observaciones astronómicas), 95.98.-e.

I. INTRODUCTION

The beginning of 2022 was marked by a significant event in the history of Russian-Cuban scientific collaboration. The international Russian-Cuban astronomical observatory (RCO) was launched on the site of Institute of Geophysics and Astronomy of the Republic of Cuba in Havana. This observatory is the first collaborative result of three scientific institutions from Russia and Cuba in the area of Astronomy: the Institute of Astronomy of the Russian Academy of Sciences (INASAN), the Institute of Applied Astronomy of the Russian Academy of Sciences (IAA RAS) and the Institute of Geophysics and Astronomy (IGA) in Havana, Cuba. It was built within the framework of inter-governmental agreements on scientific and technical cooperation between Russia and Cuba.

The first joint scientific and technical work on space research started in Cuba nearly sixty years ago. In 1964, Cuban astronomers in cooperation with Soviet specialists started systematic observations of artificial satellites, thus initiating an extensive program of space exploration from the Cuban territory. In 1966, a station for receiving radio signals from artificial satellites started operating at IGA, making possible to obtain the necessary data for studying the upper atmosphere. Simultaneously, stations for tracking artificial satellites equipped with the most advanced instruments [1] were put in operation in Havana and Santiago de Cuba. Since the middle of the 1960s, the Astronomical Council of

the Academy of Sciences of the USSR (currently Institute of Astronomy of the Russian Academy of Sciences) has been actively involved in the creation of observation sites for space research. Staff members of the Institute of Astronomy installed in Santiago de Cuba a satellite photometric camera AFU-75 and a laser rangefinder, and organized their time service. In 1969, the astronomers of The Main (Pulkovo) Astronomical Observatory and Special Astrophysical Observatory (SAO) together with Cuban colleagues started studying solar activity from the Cuban territory using a RT-3 radio telescope and a 25-cm refractor telescope [2]. Further, scientific cooperation was expanded within the framework of the "Intercosmos" program implemented by the USSR. The "Intercosmos" program included different experiments in space medicine and biology, launching of artificial satellites, and space flights piloted by international crews [3]. The Cuban scientists participated in processing the data from space satellites and studied the interaction between the magnetosphere and the ionosphere in cooperation with scientists from other countries. For many years, as part as international teams, Cuban specialists have performed optical observations of artificial Earth satellites using special photographic and laser systems. On the Cuban territory, the united telemetric system was built, which allowed receiving scientific information directly from board of "Interkosmos" satellites. Within that program, Cuban scientists participated in the projects "Atmosphere", "Big chord" and others for the observation of artificial satellites. Joint scientific work within the program "Intercosmos"

between USSR and Cuba lasted until late 1991, and was suspended due to the collapse of the Soviet Union.

A new stage of Russian-Cuban cooperation began in 2017. The "Russian-Cuban scientific, technical and environment working group" was made up of government's members and ministries representatives of the two countries. The working group approved strategic priority areas for scientific cooperation – medicine, biotechnological areas, nano-technologies, astronomy and applied mathematics. The first projects for joint implementation led to the foundation of the Russian-Cuban Observatory for astronomical researches, the Russian-Cuban Geodynamical Station, the Russian-Cuban Station of Climatic Tests for materials and construction elements in tropical conditions of the Cuban region, as well as the joint Russian-Cuban paleontological expedition for all-side study of evolutionary history of biodiversity of Cuba based on paleontological data.

The first activities on the joint Russian-Cuban Observatory started in autumn 2017 [4]. The Russian side was represented by INASAN and IAA RAS, while Cuba was represented by IGA. The first stage included the study of areas for observatory location with primary evaluation of the astroclimate and watching conditions, and the development of the architectural concept of the building. At the second stage that started in 2019, INASAN and IAA RAS finalized the list of technical and scientific equipment for the future observatory and purchased missing items. Restrictions caused by the pandemic corrected the initial plans and project schedule. The restriction delayed equipment shipment from Russia for almost one year. Due to the lockdown of 2020 – 2021, Russian specialists could not arrive in Havana to start the observatory construction. Still, in spite of many obstacles, the project was successfully implemented by the late 2021.

The observatory is located on the territory of the Institute of Geophysics and Astronomy (Havana, Cuba), which provided the entire infrastructure, including the building on which the astronomical dome was placed, and its connection to electrical and information networks. In October-November 2021, IGA, INASAN and IAA scientists jointly completed the construction of the first optical-geodetic station of the Russian-Cuban Observatory. The description of this optical station can be found in [5–7]. Figs. 1 and 2 show pictures of the station.

The main instrument of the observatory is an optical complex consisting of the 20-cm telescope *Officina Stellare Veloce* RH-200 equipped with FLI Proline 16803 CCD camera on the 10 Micron GM1000 HPS automated mount. The *Veloce* RH-200 telescope is a wide-field telescope with a 600 mm focal distance, $f/3$ focal ratio and 220-mm aperture. The telescope is equipped with a set of UBVR_I photometric filters implemented as a filter wheel. The telescope is placed into a *Scopedome* 3M dome with a diameter of 3 m. Astronomical devices are controlled through a control computer using

standard software supplied along with the instrumentation.



Figure 1. General View of Russian-Cuban observatory.

Observations can be carried out remotely in two modes, automatic and manual. In the manual mode, the telescope operator points the telescope at the object under study using special software, and sets the duration and number of exposures of the CCD camera. In the automated mode, no operator is required to perform the observational operations. An automatic observation session is controlled by a software developed at INASAN.

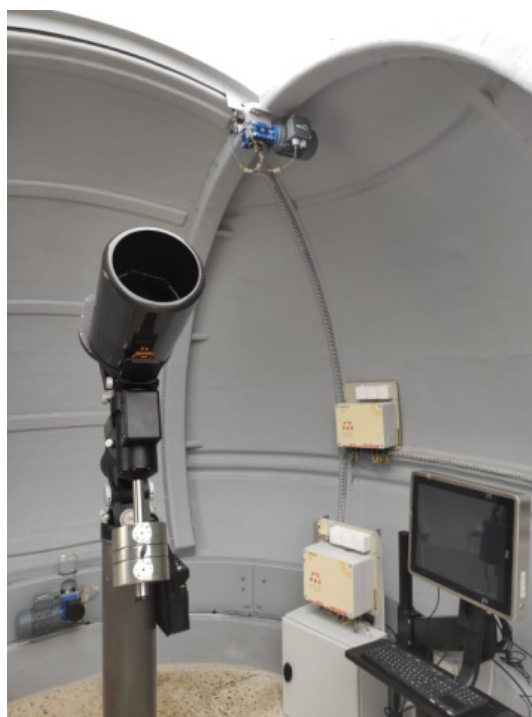


Figure 2. Overview of the space inside the dome.

Despite the fact that the observatory is located in Havana, where light pollution is strong, we are able to observe objects up to 13m in the V filter. During observation sessions from the territory of the IGA, all internal illumination of the site is turned off. To reduce scattered light in the telescope, the telescope tube was equipped with a 20 cm long hood. Observations of selected objects begin only when they rise higher than 35 degrees above the horizon and only after 22

hours, local time. Such conditions make it possible to conduct observations and obtain high-quality results.

II. THE FIRST SCIENTIFIC RESULTS OF THE OBSERVATORY

The Russian-Cuban Observatory began receiving the first scientific data by the end of 2021. From December 2021 to April 2022, 52 observation sessions were carried out. The first objects of study were the 3 stars - V410 Tau, FR Cnc and FK Com. These stars belong to rapidly rotating, chromospherically active stars. They exhibit rotational light modulation due to the presence of cold spots on their surfaces. For each star, the light curves were obtained with several photometric filters. Based on the photometric variability in the V filter, maps of surface temperature inhomogeneities were constructed for each star. The method for restoring the map of surface temperature inhomogeneities is described in detail in [8]. The light curves of the stars were analyzed using the iPH program [8]. The program allows solving the inverse problem of reconstructing the temperature inhomogeneities of a star from the light curve in a two-temperature approximation, in which the temperatures of the unperturbed photosphere and sunspots are specified. The description and tests of the program were presented in [9]. The data obtained from the stars V410 Tau, FR Cnc, and FK Com allowed estimating the area of spots on the surface of the star.

II.1. Observation and study of V410 TAU

V410 Tau is a young, fully convective T Tauri star (WTTS), about 1 million years old, with magnetic field of complex structure [10, 11]. The star was the subject of numerous studies [12]. The distance to the star is 129.4 ± 0.4 pc. V410 Tau belongs to one of the young star-forming regions C2-L1495 in the Taurus complex. The age of the star was recently estimated using GAIA data as 1.34 ± 0.19 Myr [13]. The effective temperature of the star is 4500 K, $\log(g)$ is 3.8. The mass and radius of the star (in solar units) are $1.42 \pm 0.15 M_{\odot}$ and $3.40 \pm 0.5 R_{\odot}$, respectively [11]. Paper [14] reports the study of spots evolution on the star's surface over a period of 46 years with the method of reconstructing the surface temperature inhomogeneities from photometric measurements. In addition, the star's surface has been recently mapped many times by the method of Zeeman-Doppler mapping [12]. New photometric observations of V410 Tau were carried out from December 7, 2021 to January 25, 2022. All the observations were carried out automatically according to a predetermined observational plan with no operator on duty. To achieve the optimal signal-to-noise ratio, the exposure time was chosen for each filter individually: in the B filter - 120 s, in the V, R, I filters - 90 s. A total of 400 brightness estimates were obtained in the B, V, and R photometric filters in the epoch interval HJD 2459555.738 – HJD 2459604.750.

The observational data were reduced using standard photometric calibration procedures using the Maxim DL software. The original images were subjected to the bias frame

and dark frame subtraction procedure. To eliminate the effects of illumination and dust shadows on the telescope optics, the image calibration procedure included flat field correction. The star's brightness was estimated by differential photometry. This method implies the target brightness to be estimated relatively to a comparison star that is well photometrically examined.

Following [12], we picked the comparison star to be V1023 Tau ($B=14.179^m$, $V=12.641^m$, $R=11.573^m$). The accuracy of a single measurement was RMS 0.02^m - 0.05^m in three filters. The data of the star's photometric variability in the V filter were used to construct a map of surface temperature inhomogeneities. After plotting the phase diagram, the measurement data were averaged over intervals of 0.05 phase periods, see Fig. 3.

In Fig. 3, our measurements are compared with the results published in [12] (photometric observations were made at the CrAO RAS in 2019). The observations presented are two years apart. Noteworthy are the differences in the shape of the curves at the phases between 0.0 – 0.45 (the position of the second active region on the stellar surface, see below). At the phases of 0.5 – 0.85, the curves are in a good agreement. The light curve we obtained (averaged for 20 equally spaced phases) was analyzed using the iPH program.

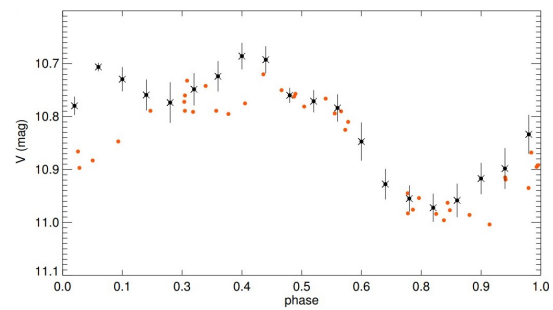


Figure 3. Phase variation of light V410 Tau in a V filter. Dark symbols with error bars – our measurements, light dots are the data reported in [12].

To construct a map of surface temperature inhomogeneities, we assumed that the effective temperature is 4500 K, and the temperature of the spots is 3750 K. The grid data of Kurucz models were used for calculations. During the simulation, the surface of the star was divided into elementary areas of the size of $6^\circ \times 6^\circ$, for which the filling factors f were determined, which are unknown quantities of our analysis. Fig. 4 shows the results of reconstruction of temperature inhomogeneities on the surface of V410 Tau for the observation period HJD 2459555.738 – HJD 2459604.750.

Based on the constructed maps, we determined the longitudes corresponding to the maximum values of f (darker areas on the maps in Fig. 4). Note that there are sunspot concentrations at two longitudes (at 290° it is pronounced, but at 80° , it is determined with a larger uncertainty). The more active region has a complex structure; it may be more elongated towards the smaller region. The position of the more active region with the longitude of 290° coincides with the position obtained in [12]

for the cold spot, phases 0.7-0.8.

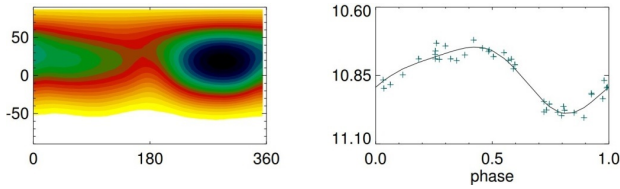


Figure 4. Results of the reconstruction of temperature irregularities on the surface of V410. Left panel: Surface maps are represented in one and the same scale, dark spots correspond to higher filling factor f values. The X and Y axes of the left-most panel are longitude and latitude axes, respectively. Right pane: Light curves (crests) and theoretical light curves developed on the basis of reconstruction simulation (solid line).

As noted above, the photometric measurements spanning the period of 46 years allowed I. Savanov [14] to restore the maps of surface temperature inhomogeneities of V410 Tau and to study the evolution of spots along with changes in the position of the dominant active region. In some cases, a second active region (longitude) located close to the counter-phase of the dominant region was detected. In [14], it is also shown that within the interval of 4800 days (13 years), lasting up to the end of 2002, the brightness minimum remained at the same phase, implying the stationary location of the active region. In late 2002, the active regions started moving across the star's surface. In our research we detected the active regions at the phases of 0.22 and 0.80, which is in agreement with the results of previous studies. According to [14], the average spotted fraction of the surface of V410 Tau (spottedness parameter S) is 32 %, varying from 27 % to 40 % within the specified observation period. In our study, we determined the value of S as 34 % (see the corresponding surface map in Fig. 4), which practically coincides with the previously determined average value.

II.2. Observations and study of FR Cnc

FR Cnc (BD + 161753 = MCC 527 + 1RXS J083230.9 + 154940) is a single young, fast-rotating star of the K7V spectral type. Its brightness is $V=10.41m$. Photometric and spectroscopic studies of FR Cnc [15, 16] gave an estimate of the rotation period of 0.8267 ± 0.0004 days. The light curves of the star significantly vary both in phase and in amplitude, which may indicate the evolution of spots on the star's surface. FR Cnc spectra demonstrate strong lines of hydrogen and ionized calcium, which prompts high stellar activity. Works [17, 18] report stellar eruptive activities.

In [19] the authors report detailed simultaneous X-ray and optical observations of FR Cnc. They found that the X-ray spectrum can be explained by a dual-temperature plasma model with the temperatures of cold and hot components of 0.34 keV and 1.1 keV, respectively. The X-ray light curve within 0.5 – 2.0 keV is rotation-modulated with the amplitude of modulation of 17 %. This light curve also demonstrates anti-correlation with optical light and color curves, the maximum of X-ray radiation corresponds to the minimum of optical emission and colder spots on the surface of FR Cnc. The X-ray brightness of FR Cnc has remained almost constant

for the last 30 years with the average total flux of $4.85 \cdot 10^{29}$ erg/sec within 0.5 – 2.0 keV energy range.

New photometric observations of FR Cnc were carried out from December 17, 2021 to January 3, 2022, during the second half of the night, at optimal visibility conditions. This study continues a long-term monitoring of FR Cnc initiated by a team of scientists in 2019 [18].

The observations were carried out in the automatic mode following a preset program with no operator involvement. Exposure times were individually selected for each filter: B – 90 sec, V and R filters – 60 sec. In total, each filter provided 200 estimates of the brightness. Observation data were processed under the standard photometric calibration procedure. To measure brightness variations we used the method of differential photometry. The comparison star was BD+16 1751 ($B=10.22^m$, $V=9.51^m$, $R=8.72^m$). The RMS of a single measurement was 0.01^m - 0.012^m in the three filters. No flares were registered during the observations.

The measured photometric variability in the V filter was used to construct a map of surface temperature inhomogeneities. Following the computation of the phase diagram, the data were averaged over phase intervals of 0.05 (see Fig. 5). When comparing with the results of our previous observations in [18], we can conclude that the shape of the light curve has changed – the light minimum corresponding to phase 0.65 has almost disappeared.

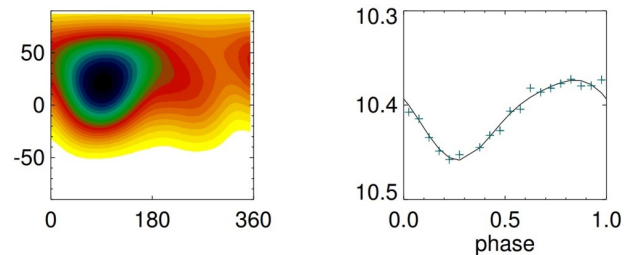


Figure 5. Results of reconstruction of temperature inhomogeneities on the surface of FR Cnc. Left panel: Surface maps are presented on a single scale, darker areas correspond to higher values of the fill factors f . On the abscissa and ordinate axis we have longitude and latitude in degrees, respectively. Right panel: observed light curves (crosses) and the restored light curve (solid line).

The map of surface temperature inhomogeneities was reconstructed using the technique described in detail above. Similar to [20], we assumed that the effective temperature of FR Cnc is $T_{\text{eff}} = 4250$ K, and the spots' temperature is 3000 K. The brightness of the star in the V filter, given the absence of spots on its surface, was taken equal to 10.3m. According to [20], the inclination angle of the star's rotation axis to the line of sight is 55° . Fig. 5 shows the resulting reconstructed map of temperature inhomogeneities on the FR Cnc surface for the observations by the end of 2021. As noted earlier in [18, 20] FR Cnc spots concentrate near two longitudes (one of them is more pronounced) possibly connected by a bridge, which is very visible on Doppler maps built from spectral observations of 2004. In the map based on observations of 2021 the smaller spot is quite weak; it almost disappears. According to [18], the spotted fraction of the star's surface in the beginning of 2019 was about 12 %. In 2021, the fraction decreased down to 8 %.

To compare, in 2004 according to [20] (based on the results of Doppler mapping) the spotted fraction was only 6 % of the total surface of FR Cnc.

II.3. Observations and study of FK Com

The star FK Com (FK Comae Berenices, HD117555) is a very-fast rotating yellow giant. It is commonly believed that this single star was formed by merging components of a binary star. Its chromo-spheric activity is accompanied by intense ultraviolet and X-ray radiation, as well as flares [21]. FK Com is actively studied by ground-based photometry and spectroscopy, as well as by space telescopes in the UV and gamma wavelength ranges. The brightness of the object is $V=8.245m$, spectral class is G5III. The photometric rotation period of FK Com is estimated as 2.4 days. Its photometric variability is related to the rotational modulation of emission from spotted star surface. Photometric studies of FK Com led to discovery of a phenomenon of changing active longitudes (flip-flop phenomenon) [22].

New photometric studies of FK Com had been carried out at the RCO from March 5, 2022 to April 3, 2022. This observational work on the FK Com is a continuation of the series of works carried out by the team of authors since 2013. The observations were carried out automatically. The star was imaged only in the V filter. The exposure time was 15 seconds. During the observational period, 1570 brightness estimates were obtained. The observational data were processed using standard photometric reduction procedures. For differential photometry of the star FK Com, the star HD117567 (F2, $V=7.62^m$) was used as a reference. The RMS of a single measurement was 0.02^m . No flares were recorded during the observations.

The photometric variability in the V filter was used to construct a map of surface temperature inhomogeneities. Following the computation of the phase diagram, the data were averaged over phase intervals of 0.05 (see Fig. 6). After analysing the new data, we can conclude that the shape of the light curve has changed in comparison with our previous observations [23]. The light modulation is weak, and the light curve itself has two weakly expressed minima corresponding to phases 0.25 and 0.55. The spotted fraction of the surface is 14 %, which is slightly lower than the average spottedness (parameter $S = 0.18$) [20]. Note that a “flat” light curve of FK Com, similar in shape, was recorded previously in 1998 – early 1999 [22].

From March 5 to April 3 2022, FK Com was also available for observations from the European part of Russia. Therefore, joint observations of FK Com were carried out at two observatories - at the Zvenigorod Observatory of INASAN and at the Russian-Cuban observatory in Havana. On the night of March 30 to March 31, an experiment was carried out on continuous observations of the star. We obtained a continuous series of observations of a single object 9.7 hours long. The Zvenigorod observations were made before dawn, the duration of observations was 2.5 hours. 15 minutes after the end of observations in Zvenigorod, the Russian-Cuban

observatory in Havana continued the run. The results of joint observations showed that a distributed observational network can be successfully implemented on the basis of two observatories.

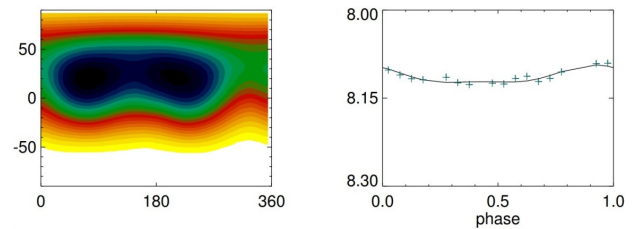


Figure 6. Results of the reconstruction of temperature inhomogeneities on the surface of FK Com. Left panel: Surface maps are presented on a single scale, darker areas correspond to higher values of the fill factors f . On the abscissa and ordinate axis we have longitude and latitude in degrees, respectively. Right panel: Observed light curves (crosses) and the theoretical light curves constructed from the reconstructed model (solid line).

III. CONCLUSIONS

In the course of joint work carried out by the Institute of Geophysics and Astronomy of Cuba and the Institute of Astronomy of the Russian Academy of Sciences and with the active support of the Ministry of Science, Technology and Environment of the Republic of Cuba and the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, a joint Russian-Cuban astronomical observatory was built.

The observatory carried out optical observations of the chromospherically active stars V410 Tau, FR Cnc and FK Com. The first observations within the period December 2021 - April 2022, resulted in obtaining light curves of the mentioned objects with photometric filters B, V, R. It should be noted that within the specified period, INASAN observatories could not observe these objects due to poor weather conditions, so the observations of the Russian-Cuban Observatory perfectly filled this gap. The measured light curves of V410 Tau, FR Cnc and FK Com allowed us to construct the maps of surface temperature inhomogeneities of these objects. According to our estimate, the spotted fractions of the total surface area are 32 %, 8 %, and 14 % for V410 Tau, FR Cnc, and FK Com, respectively. The results of the joint observations of FK Com from the territories of Russia and Cuba have shown the capabilities of a distributed observational network.

The creation of an RCO is a new stage in the scientific cooperation between Russia and Cuba. In the future, the observatory will become a new center for education and professional training of Cuban astronomers and technical specialists.

REFERENCES

- [1] H. Molinet, Cuba **12**, 18 (1980).
- [2] A. P. Kulish, News of the Main Astronomical Observatory in Pulkovo **219**, 56 (2009).
- [3] V. Márquez, Rev. Cubana Fis. **37**, 61 (2020).
- [4] D. V. Bisikalo, I. S. Savanov, S. A. Naroenkov, M. A. Nalivkin, A. S. Shugarov, N. S. Bakhtigaraev, P. A. Levkina, M. A. Ibragimov, E. Y. Kilpio, M. E. Sachkov,

- A. P. Kartashova, A. M. Fateeva, M. R. R. Uratsuka, R. Z. Estrada, A. A. Díaz, O. P. Rodríguez, F. H. Figuera and M. G. García, *Astron. Rep.* **62**, 367 (2018).
- [5] A. Alonso Díaz, M. Rodrigues Uratsuka, O. Pons Rodríguez, Z. Barcenás Fonseca, R. Zalvidar Estrada, N. Paula Acosta, D. V. Bisikalo, M. E. Sachkov, M. A. Ibrahimov, I. S. Savanov, M. A. Nalivkin, S. A. Naroenkov, A. M. Fateeva and A. S. Shugarov, *Rev. Cubana Fis.* **37**, 162 (2022).
- [6] D. V. Bisikalo, M. E. Sachkov, M. A. Ibrahimov, I. S. Savanov, M. A. Nalivkin, S. A. Naroenkov, A. M. Fateeva, A. S. Shugarov, R. M. Mata, O. R. Pons and M. R. Uratsuka, *Astron. Rep.* **66**, 43 (2022).
- [7] M. Ibrahimov, D. Bisikalo, A. Fateeva, R. Mata and O. Pons, *Contrib. of the Astron. Obser. Skal. Ples.* **51**, 280 (2021).
- [8] I. S. Savanov, S. A. Naroenkov, M. A. Nalivkin, V. B. Puzin and E. S. Dmitrienko, *Astr. Bul.* **73**, 344 (2018).
- [9] I. S. Savanov and K. G. Strassmeier, *Astron. Nach.* **329**, 364 (2008).
- [10] M. B. Skelly, J. F. Donati, J. Bouvier, K. N. Grankin, Y. C. Unruh, S. A. Artemenko and P. Petrov, *Mon. N. of the R. Astron. Soc.* **403**, 159 (2010).
- [11] L. Yu, J. F. Donati, K. Grankin, A. Collier Cameron, C. Moutou, G. Hussain, C. Baruteau, L. Jouve and MaTYSSSE Collaboration, *Mon. N. of the R. Astron. Soc.* **489**, 5556 (2019).
- [12] B. Finocciety, J. F. Donati, B. Klein, B. Zaire, L. Lehmann, C. Moutou, J. Bouvier, S. H. P. Alencar, L. Yu, K. Grankin, E. Artigau, R. Doyon, X. Delfosse, P. Fouque, G. Hebrard, M. Jardine, A. Kospal, F. Menard, F. Menard and SLS consortium, *Mon. Note of the R. Astron. Soc.* **508**, 3427 (2021).
- [13] D. M. Krolikowski, A. L. Kraus and A. C. Rizzuto, *Astron. J.* **162**, 110 (2021).
- [14] I. S. Savanov, *Astron. Rep.* **56**, 722 (2012).
- [15] J. C. Pandey, K. P. Singh, S. A. Drake and R. Sagar, *The Astron. J.* **130**, 1231 (2005).
- [16] J. C. Pandey, K. P. Singh, R. Sagar and S. A. Drake, *Infor. Bul. on Var. S.* **5351**, 1 (2002).
- [17] A. Golovin, E. Pavlenko, Y. Kuznyetsova and V. Krushevska, *Information Bulletin on Variable Stars* **5748**, 1 (2007).
- [18] I. S. Savanov, S. A. Naroenkov, M. A. Nalivkin, J. C. Pandey and S. Karmakar, *Astronomy Letters* **45**, 602 (2019).
- [19] J. C. Pandey, G. Singh, S. Karmakar, A. Joshi, I. S. Savanov, S. A. Naroenkov and M. A. Nalivkin, *J. of Astro. and Astron.* **42**, 65 (2021).
- [20] A. Golovin, M. C. Gálvez-Ortiz, M. Hernán-Obispo, M. Andreev, J. R. Barnes, D. Montes, E. Pavlenko, J. C. Pandey, R. Martínez-Arnaiz, B. J. Medhi, P. S. Parihar, A. Henden, A. Sergeev, S. V. Zaitsev and N. Karpov, *Mon. Note of the R. Astron. Soc.* **421**, 132 (2012).
- [21] V. B. Puzin, I. S. Savanov, E. S. Dmitrienko, I. I. Romanyuk, E. A. Semenko, I. A. Yakunin and A. Y. Burdanov, *Astrop. Bul.* **71**, 189 (2016).
- [22] H. Korhonen, S. V. Berdyugina and I. Tuominen, *Astr. and Astrop.* **390**, 179 (2002).
- [23] I. Savanov, S. Naroenkov, M. Nalivkin and A. Shugarov, *Contrib. of the Astron. Obser. Skal. Ples.* **49**, 415 (2019).

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.



LA FÍSICA EN LA UNIVERSIDAD CENTRAL "MARTA ABREU" DE LAS VILLAS (PERÍODO 1952-1985)

PHYSICS AT CENTRAL UNIVERSITY "MARTA ABREU" OF LAS VILLAS (PERIOD 1952-1985)

J. E. HERNÁNDEZ-RUIZ^{a†}, A. DUFFUS-SCOTT^b

a) Dpto. de Física, Facultad de Matemática, Física y Computación, Universidad Central de Las Villas, Santa Clara 54830, Villa Clara, Cuba; jesusehr@uclv.edu.cu[†]

b) Centro de Investigación de Soldadura, Facultad de Ingenierías Mecánica e Industrial, Universidad Central de Las Villas, Santa Clara 54830, Villa Clara, Cuba; aduffus@uclv.edu.cu

[†] autor para la correspondencia

Recibido 5/8/2022; Aceptado 25/11/2022

Se relatan los hechos más sobresalientes de la Historia de la Física en la Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas (UCLV), desde su fundación el 30 de noviembre de 1952 hasta 1985, en que se cierra la carrera de Licenciatura en Física. Se analiza el desarrollo alcanzado en la enseñanza de la Física y los resultados obtenidos en Ciencia y Técnica, así como las causas que condicionaron uno u otros hechos, sus consecuencias y el papel del colectivo y de sus líderes. Entre los aspectos analizados sobresalen la existencia de una cátedra de Física desde los primeros tiempos de la UCLV, el papel protagónico del Profesor de Mérito Dr. José Enrique Villar Lorenzo y su legado, la apertura y cierre de la carrera de Física, el papel de la asesoría soviética en el desarrollo de la Física en la UCLV y particularmente de la Física de los Metales, la cual llegó a alcanzar reconocimiento nacional.

Outstanding facts in the History of Physics at Central University "Marta Abreu" of Las Villas (UCLV) from its foundation, on November 30th of 1952, until the closing of Physics studies in 1985 are discussed in chronological order. The development achieved in the teaching of Physics and related scientific and technical achievements, are analyzed. The existence of a Physics Chair from the UCLV early days, the leading role of the Emeritus Professor Dr. José Enrique Villar Lorenzo and his legacy, the opening and closing of the degree course in Physics, the role of the Soviet collaboration on the development of Physics at UCLV and particularly on the Physics of Metals –which reached national prestige– are some of the elements under analysis.

PACS: History of science (historia de la ciencia), 01.65.+g; Physics career (carrera de física), 01.85.+f; Physics education (educación física), 01.40.-d; Science and society (ciencia y sociedad), 01.75.+m

I. INTRODUCCIÓN

Desde los años iniciales de la presente centuria, la comunidad de físicos cubanos, a título personal y en colaboración con instituciones y personalidades extranjeras, vienen realizando ingentes esfuerzos para documentar y divulgar la historia de las ciencias físicas en el país [1]. Sin embargo, la descripción de hechos y acontecimientos sobre la Historia de la Física en la UCLV son escasos, y en algunos casos, los datos que se ofrecen no se corresponden completamente con la realidad [1–5]. El presente trabajo se enmarca dentro de estos esfuerzos y tiene el propósito de presentar y documentar algunos apuntes sobre la Historia de la Física en la UCLV, desde el inicio de sus actividades académicas en noviembre de 1952 hasta 1985, año este en que se cierra la carrera de Licenciatura en Física (LF).

II. LA FÍSICA EN LA NACIENTE UCLV (1952-1969)

La UCLV efectuó su apertura oficial el domingo 30 de noviembre de 1952. Las actividades académicas se iniciaron con las carreras de Ingeniería Química-Industrial, Ingeniería Agronómica, Perito Químico-Azucarero, Ciencias Comerciales, Filosofía y Letras, Pedagogía y Profesor de Idioma Inglés [6]. De estas carreras, las tres primeras contemplaban en su currículo la disciplina Física. De la

docencia de Física se ocupaba la cátedra "C" de la Facultad de Ingeniería, en su Sección "Doctores en Ciencias", la que era común para las tres carreras, en tanto de la docencia de Física Agrícola se encargaba la Sección "Ingenieros Agrónomos" de la propia cátedra "C". La sección "Doctores en Ciencias" de esta cátedra fue ocupada, entre otros, por el Ing. Ramón Lorenzo Más Martín y los doctores Vicente Hernández Serugham, Roberto Lanier Valdez, Ofelia Martínez Gómez y Pedro Oliver Labra [7,8]. Este último fue rector de la UCLV desde mayo a noviembre de 1960, momento en que emigró del país [9], formando parte del éxodo de profesores, médicos y otros profesionales que tuvo lugar en aquellos años iniciales de la Revolución. Este éxodo se debió a múltiples causas: desde la pertenencia a estratos sociales medios o altos, hasta haber estado involucrados en actos de corrupción, o el haberse declarado explícitamente opuestos al nuevo gobierno, muchas veces alentados por campañas de propaganda alentadas en contra del mismo, incluso desde Estados Unidos.

Por otra parte, en la búsqueda e indagaciones realizadas, no se encontraron evidencias de que en el campo de las ciencias físicas se hayan realizado investigaciones previas a 1959, por lo que es razonable suponer que la investigación científica en temas de Física, en la naciente universidad, fue nula.

En 1957 en la Facultad de Ingeniería de la UCLV se funda la Escuela de Ciencias. Su decana fue la Dra. en

Ciencias Físico-Matemáticas Ofelia Martínez Gómez (en la nomenclatura de cargos de esa época en la universidad existía el decano de Facultad y el decano de Escuela. A estos últimos posteriormente se les nombraría directores de Escuela). En esta facultad se estudiaban, además de doctorado en Ciencias Naturales, las carreras de Doctor en Ciencias Físico-Matemáticas y en Ciencias Físico-Químicas, con planes de estudio similares al de sus homólogas de la Universidad de la Habana (UH) y con cuatro años de duración [10] (debe aclararse que el título de “Doctor” no es equiparable al grado científico actual). Sin embargo, ni los planes de estudio, ni el perfil ocupacional de los egresados de estas carreras estaban al nivel del licenciado actual, pues según Altshuler y Baracca [3] aunque los planes de estudio contemplaban las físicas teóricas, la introducción de la investigación científica en la formación de los físicos en Cuba, tuvo que esperar a la Reforma Universitaria de inicios de la década de los 60 de pasado siglo.

En 1959, a la Escuela de Ciencias de la UCLV se le confiere el estatus de Facultad y es inaugurada como tal el 23 de febrero de este año con tres escuelas: Físico-Química, Físico-Matemática y Ciencias naturales, que después se traslada para la Universidad de La Habana (UH) y en su lugar se incorpora la escuela de Psicología. Su decana continuó siendo la Dra. Martínez Gómez hasta que ésta emigra, y asume el Dr. Osvaldo Mier Febles [11].

De estas carreras sólo se efectuaron tres graduaciones, la primera tuvo lugar en 1962 y la tercera y última en 1964 [12].

En 1963, como parte de la Reforma Universitaria, en la Facultad de Ciencias de la UCLV, se crean las escuelas de Matemática y Química, esta última con la carrera de Licenciatura en Química y dos departamentos docentes, el de Química y el de Física. El jefe del Departamento de Física fue el eminente profesor y Profesor de Mérito de la UCLV, el Dr. José Enrique Villar Lorenzo [11]. Este departamento cubría la docencia de Física, no sólo de la carrera de Licenciatura en Química, sino de todas las carreras de Ciencias Naturales y Exactas, Técnicas y Agrícolas de la UCLV; y estuvo integrado entre otros profesores por el Dr. Ramón Lorenzo Mas Martín, y las doctoras Mirta Francos Francos, Carmen Companioni Acosta, Beatriz Córdova Ríos, Amalia Alonso Beceiro y María Dolores Rodríguez Palacios, quien fuera una de los dos graduados de Dr. en Ciencias Físico-Matemática de ese propio año 1963.

Entre los años 1966 y 1969 la profesora Alonso Beceiro prepara a los estudiantes de ingeniería Fabio Martínez Granado, Pedro Álvarez Hernández, Eduardo Cruz González y Juan Valentín Lorenzo Ginori, para que trabajaran como profesores de Física [13]. Estos cuatro estudiantes se desempeñan como instructores no graduados, impartiendo Física a las carreras de ingeniería, labor que continúan realizando una vez graduados, ya como profesores de plantilla.

En este periodo los profesores del Departamento de Física de la Escuela de Química escriben y editan una Serie de Cuadernos de Prácticas de Física y otros manuales y folletos de apoyo a la docencia, entre los que se encontraban Prácticas de Acústica y Óptica (1966), Prácticas de Calor (1967), y Prácticas

de Mecánica (1968). Estos materiales docentes siempre fueron elaborados bajo la orientación y supervisión del Dr. Villar Lorenzo, tal cual expresaran Córdova Ríos y Rodríguez Palacio (1968) en el prólogo del Manual de Prácticas de Mecánica [14].

Los profesores de aquel departamento y el propio Villar Lorenzo, son reconocidos y recordados hoy día, por quienes fueron sus alumnos, como excelentes profesores, con conocimientos muy amplios y elevada maestría pedagógica.

III. LA FÍSICA EN LA UCLV DESDE 1969 HASTA 1985

III.1. *La Escuela de Física de la UCLV*

En 1969 se funda la Escuela de Física (EF) y se inicia la carrera de Licenciatura en Física (LF) en la Facultad de Ciencias de la UCLV. En sus inicios, la EF fue dirigida por el Ing. Octavio Valdés Chaviano y contó con el Departamento de Física, dirigido por la Dra. María Dolores Rodríguez Palacios y encargado de la impartición de la docencia de Física General a las carreras de Ciencias Naturales, Exactas (incluida a la propia carrera de LF) y Agrícolas [15]. Al ingeniero Valdés Chaviano le sucedieron como directores de la EF el MSc. Alejandro Fonseca Duarte y el Lic. Alejandro Duffus Scott.

En la etapa inicial de la EF, el claustro estaba integrado fundamentalmente por profesores de Santa Clara, Cienfuegos y otros procedentes de la Habana, pues la UH, en calidad de centro rector en la formación de físicos del país, colaboró en la creación y primeros pasos de la EF de la UCLV [15]. Entre los que procedían de la Habana se encontraban los licenciados Irma González Carmentate, Carlos Cuba Vilela, Mario Naito, Jorge Molina, Mario Álvarez Guerra y Rodrigo Orisondo, y el ingeniero Eudaldo García Tarajano, entre otros. Al mismo tiempo, se trasladaron para EF de la UCLV estudiantes que cursaban la LF en la UH y residían en la región central del país, con el propósito de, una vez graduados, se incorporasen al claustro de esta escuela.

En la fundación y pasos iniciales de la EF, tuvieron un papel protagónico el profesor Villar Lorenzo, calificado como el *alma* de la escuela [16], el Contador Público Gonzalo Palencia Méndez, quien fuera Decano de la Facultad de Ciencias de 1969 a 1973, el primer director de la escuela y su claustro, quienes supieron sortear no pocas dificultades y anular el efecto de los detractores internos y externos, que no faltaron.

En 1973 tiene lugar la primera graduación de siete egresados de la EF, de los cuales cinco procedían de la UH y culminaron sus estudios en la UCLV. Los otros dos, Francisco García Reina y Gabriel Mesa Romero, procedían de carreras de ingeniería de la propia UCLV y al abrirse la carrera de LF en el curso 1969-1970 hicieron el cambio de carrera [17]. De estos primeros graduados de LF, se incorporan al claustro de la EF Alejandro Duffus Scott, Daniel Codorniu Pujals, Arcelio Hernández Ferreira y Manuel Acosta Acosta, en tanto Leonides Peraza López es ubicado en la entonces Escuela de Pedagogía de la propia UCLV. La segunda graduación de la EF, que tiene lugar en 1974, es más numerosa, con 11 graduados [17] de los cuales la mayoría, que ya venían desempeñándose como alumnos

ayudantes (llamados *monitores* por aquel entonces) también se incorporan al claustro. Algunos cursos más tarde, sólo permanecen en él los licenciados Carlos Rodríguez Fadrugas, Francisco Arturo Ruiz Martínez, Marta Fernández López y Hugo Sánchez Morales, de los cuales, se mantiene laborando en el actual Departamento de Física (DF) el Dr. Rodríguez Fadrugas.

En el año 1976 se funda el Ministerio de Educación Superior (MES), se separa la Escuela de Psicología de la Facultad de Ciencias y desaparecen las escuelas como unidades estructurales y organizativas. La Facultad de Ciencias de la UCLV pasa a ser Facultad de Ciencias Exactas, con tres carreras de licenciatura: la de Matemática, la de Química y la más joven, la de LF.

De las sucesivas graduaciones de LF, engrosaron las filas del claustro de la EF primero y de sus departamentos después, además de los ya mencionados de las dos primeras graduaciones, varios egresados. De estos últimos, sólo permanece en el claustro actual del DF el Lic. Emilio Viamonte Fernández, quien ha desempeñado diversas responsabilidades administrativas, políticas y sindicales en la UCLV y fuera jefe del DF entre 1992 y 1995. También permaneció en el DF el profesor Víctor Manuel Mujica Marcelo hasta de jubilarse por problemas de salud en diciembre de 2016 y falleciera un año después [18].

De la carrera de LF de la UCLV desde su primera graduación en 1973 hasta que tiene lugar la de 1985, en que se cierra la carrera, egresaron un total de 46 Licenciados en Física con un perfil orientado a la Física de los Metales [17]. Ellos han aportado, y muchos de ellos aún aportan, al desarrollo de la región central del país y muy particularmente de la Física en las universidades de esta zona.

III.2. Los departamentos de física de la UCLV

En 1969 se funda en la UCLV la Facultad de Tecnología, que contó con la Escuela de Ciencias Básicas formada por los departamentos de Matemática, Física y Química, los cuales se encargaban de la docencia de estas disciplinas a las carreras de ingeniería. El Departamento de Física fue dirigido por el ingeniero electricista recién graduado Lorenzo Ginori. Entre los profesores de este departamento se encontraban los también ingenieros Martínez Granado y Álvarez Hernández. Posteriormente se incorporarían, entre otros, los ingenieros José Rivero Díaz y Jesús Baladrón [13].

El Departamento de Física de la Escuela de Ciencias Básicas deja de existir en 1976 al desaparecer las estructuras de escuelas. El Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas, que dirigía el Lic. Sánchez Morales, pasa a ser Departamento de Física General (DFG) y asume toda la docencia de Física de la UCLV. Internamente el DFG se divide en dos secciones, una donde se agrupaban los profesores que investigaban en Física de los Metales y otra, en la que se encontraban los que lo hacían en temas didácticos y metodológicos [16]. El DFG fue dirigido primero por el Lic. Morales Sánchez (1975-1978) y después por el Lic. Duffus

Scott (1979-1986). Para el trabajo docente y metodológico el DFG se estructuró en colectivos docentes, lo cual fue altamente favorecido con los planes de estudio B (1982-1990), pues los programas de Física para las Ciencias Técnicas se homogenizaron [19]. La estructuración del DFG en colectivos docentes fue heredada del Departamento de Física de la Escuela de Química, dentro de la Facultad de Ciencias Exactas. Estos colectivos docentes fueron los de las asignaturas Física I, Física II, Física III para las Ciencias Técnicas, sus similares para las Ciencias Exactas y Agrícolas, y los colectivos de los laboratorios correspondientes. Esta estructuración, excepto para los laboratorios, desaparece con los Planes C, cuando fue preciso crear Colectivos de Física para cada una de las carreras a las que se imparte Física.

La dirección de estos colectivos recayó sobre los profesores más experimentados, los cuales jugaron un papel fundamental en la formación de los profesores noveles. Mención especial para el profesor Villar Lorenzo por su ejemplo y papel en la formación de varias generaciones de profesores de Física, en la que destaca la impartición de diferentes tipos de cursos y particularmente, al inicio de cada semestre y previo al inicio de las clases de laboratorio, el desarrollo de Seminarios de Laboratorio con los técnicos y profesores que después impartirían estas clases [20]. También se destaca, ya en los años 80 del pasado siglo, el profesor Fadrugas Rodríguez en el rescate de los laboratorios de Electricidad-Magnetismo y de Óptica-Física Moderna, que con el auxilio de los técnicos, se realizara en aquellos años [20].

Como parte de una nueva estructura universitaria, en 1978 Química y Física se separan de Matemática y se forman dos facultades, la de Matemática-Computación y la de Química-Física, esta última con dos carreras, las de Licenciatura en Química y en Física, y se crea el Departamento de Física de los Metales (DFM). El jefe de este departamento fue el Lic. Ruiz Martínez, quien era egresado de la segunda graduación de la EF y fuera profesor de Física de la UCLV por más de 30 años, hasta su jubilación [16]. El DFM atendía a la carrera de LF y como ella, tuvo una vida muy efímera, pues al asumir la dirección del DF en noviembre de 1986, el ya Dr. Lorenzo Ginori, el DFM y el DFG ya se habían integrado en uno solo, el Departamento de Física, estructura y nombre que conserva hasta la actualidad.

Entre 1976 y 1980, debido a la carencia de físicos de profesión y a la experiencia anterior del Departamento de Física de la Facultad de Tecnología de la UCLV, se decide que parte de la docencia de Física para las carreras de ingeniería se impartiera por ingenieros recién graduados de estas carreras. Ello exigió la realización de un arduo trabajo metodológico, dirigido por los profesores más experimentados de DFG, quienes no sólo se desempeñaron como conferencistas, sino que elaboraban los materiales docentes y preparaban a los profesores que impartían las clases prácticas y de laboratorio. Fue esto lo que permitió, según las palabras del hoy Profesor de Mérito de esta universidad, el Dr. Jorge Laureano Moya Rodríguez, que profesores de poca experiencia pudieran impartir una docencia decorosa [21]. Entre aquellos que se desempeñaron como profesores de Física para las ingenierías, y que después fueron ilustres profesores de la UCLV, destacan,

además del ya mencionado, los doctores Giraldo Valdés Pardo, Ramón Ramiro González Pérez, Jesús Castellanos Estupiñán y René García Depestre, las doctoras Marta Bravo de las Casas, Guiselda Fernández Levy e Irenia Gallardo Aguilar, y el MSc. Issac Pedroso Mantilla [21].

III.3. La asesoría soviética

La EF de la UCLV primero y el DFM después, lograron en poco tiempo alcanzar un alto nivel en las investigaciones en Física de los Metales, con reconocimiento nacional. Esto fue posible debido al trabajo de sus estudiantes y profesores con la asesoría de la entonces Unión Soviética (URSS). Aunque la asesoría soviética en Física, fue fundamentalmente en Física de los metales, hubo físicos que investigaron en Polímeros con los químicos, donde también estuvo presente la asesoría soviética [23].

Los asesores soviéticos en Física, en la década de los 70 del pasado siglo, fueron los doctores Pantalimon Afanasiev, Boris Poteijin, Galina Gaskoba, y Alexeí V. Belotski, quien visitó la escuela solo por tres semanas, pero su aporte fue fundamental, pues legó la metodología de realización de los procesos de nitruración. De estos asesores, Afanasiev asesoró a la escuela en la escritura de los programas de Física y Potiejin sobresalió por su determinante contribución al desarrollo de la Física de los Metales: él tuvo la capacidad para aglutinar a los profesores y estudiantes de la EF en el desarrollo de las investigaciones en esta temática. Además, Potiejin fue el asesor soviético que más cursos impartió en la EF de la UCLV (se han podido listar 5 cursos, todos relacionados con la Física de los Metales) y poseía un carácter y trato similares a los de los cubanos, lo que le permitió insertarse de forma especial en el colectivo [15]. Estos asesores entrenaron, no sólo a profesores del claustro, sino que también contribuyeron a la formación de los estudiantes de LF, los cuales asistían como oyentes a sus cursos de postgrado. Además, en estos cursos participaron profesores e investigadores de centros e instituciones de otras regiones del país, por lo que la UCLV se convirtió en un centro de referencia nacional, cuando de la Física de los Metales se trataba [15]. Todos estos cursos contaron con folletos y manuales escritos por los profesores soviéticos. Lamentablemente, de los materiales por ellos elaborados, sólo se conserva un ejemplar del Manual de Técnicas Experimentales en Metales de la autoría de la profesora Galina Gaskoba y editado por la Imprenta Universitaria en 1983, el cual guarda con celo el profesor Eduardo Valencia Morales.

El aporte fundamental de los asesores soviéticos no fue solamente en la formación inicial en Física del Estado Sólido y Física de los Metales de los miembros del claustro de la EF (o del DFM) y de sus estudiantes, sino que al mismo tiempo facilitó el establecimiento y profundización de las relaciones con la URSS, particularmente con el Instituto Politécnico de Kiev y el Instituto de Física de los Metales de la Academia de Ciencias de Ucrania, donde realizaron sus estudios de doctorado con modalidad compartida Duffus Scott, Codorniu Pujals y Hernández Ferreira. El primero de ellos obtuvo el

título de Doctor en Ciencias Técnicas en la Especialidad “Física de los Metales y Metalografía” en 1982, mientras que Codorniu Pujals y Hernández Ferreira se reciben en 1983 en la misma especialidad [23]. Durante el período de formación de estos doctores se eleva considerablemente el nivel de las investigaciones en Física de los Metales y la calidad de la asesoría al trabajo científico de los estudiantes de LF, pues los doctorados de estos profesores estaban directamente relacionados con las investigaciones que se ejecutaban en el DFM y con los trabajos de tesis de los estudiantes, como parte de la pirámide del trabajo científico.

Desde mediados de la década del 70 hasta finales de los años 80 del pasado siglo, las publicaciones de los profesores de la EF primero y del DFM después, fueron, según se puede constatar en los currículos de estos profesores, fundamentalmente en la Revista Cubana de Física, en Construcción de Maquinarias (UVLC), en *Metalofizika* y en *Fizika Metalov i Metalovedienie* bajo el liderazgo científico de los asesores soviéticos y de los profesores Duffus Scott y Codorniu Pujals. También sobresale el premio Anual al Mérito Científico-Técnico por la Memoria Científico Técnica más destacada en la UCLV en 1982 del primero de estos profesores. Asimismo, se destaca la caracterización micro-estructural y de las propiedades mecánicas de las aleaciones del sistema Al-Cu para la fabricación de cafeteras por la Industria Nacional Productora de Utensilios Domésticos de Santa Clara (INPUD) [24], así como el montaje y puesta en funcionamiento de los laboratorios de Metalografía y Microscopia Óptica, Difracción de rayos X, Análisis Térmico Diferencial, Análisis Espectral de Emisión Atómica y otros, empleados tanto en la docencia como en la investigación en la carrera de LF, la puesta a punto del equipo de nitruración por bombardeo iónico y la fabricación del primer equipo para investigar el fenómeno de fatiga en probetas planas de aceros inoxidables [23]. Todos estos resultados dan fe de la pertinencia de las investigaciones que se desarrollaron en aquella época y del papel fundamental que jugó la asesoría soviética en la gestación inicial y consolidación de una Escuela en Física de los Metales en la UCLV.

El legado más significativo de la asesoría soviética en Física trascendió más allá de los resultados antes descritos, y fue tal vez, el aporte de un método general para el estudio y caracterización de los metales y de una metodología para correlacionar las propiedades micro-estructurales con las propiedades generales de los materiales. Esta metodología aún es empleada, no sólo en el estudio de los materiales metálicos, sino también en el estudio de una amplia gama de materiales en diferentes centros de investigación en la UCLV y en fábricas e industrias del territorio, tales como la Empresa de Producciones Mecánicas “Fábrica Aguilar Noriega” (Planta Mecánica), INPUD y la Fábrica de Traviesas “Cuba 71” encargada de producir traviesas de hormigón para el ferrocarril entre otras, donde laboraron o laboran los graduados de LF de la UCLV de las décadas de los 70 y 80 del pasado siglo.

III.4. El cierre de la carrera de LF

Después de 16 años de la apertura de la carrera de LF en la UCLV, la misma se cierra en julio de 1985. Las autoridades universitarias y de la facultad de Química-Física de la época, informaron que la Junta Central de Planificación había estimado que para Cuba era suficiente con los físicos que se formaban en la UH y en los países del entonces Campo Socialista [16, 25]. Esto, unido a la baja matrícula de la carrera en contraposición con la muy alta de las ingenierías y la consecuente necesidad de profesores para la prestación de servicios de física a estas carreras, y sobre todo a la falta de defensa y argumentación de la importancia de la carrera de LF para el desarrollo del territorio, y la universidad, por parte del claustro de Física y de las autoridades universitarias y territoriales de aquel entonces, condujo a su cierre. Curiosamente, esta situación fue diferente de lo que ocurrió en la UO, donde la carrera de LF nunca llegó a cerrarse. En opinión de José Luis García Cuevas, vicerrector de investigación y postgrado en aquel momento y quien fuera rector de la UCLV (1990-1996), lamentablemente fallecido recientemente, el cierre de la carrera de LF de la UCLV fue un acierto táctico, pero un error estratégico [26].

El cierre de la carrera de LF repercutió negativamente en el desarrollo de la Física como ciencia básica, no sólo en la UCLV, sino en todo el territorio de la región central del país. De modo directo incidió en el éxodo de varios de los profesores más preparados con que contaba el DF y en el desmantelamiento de su infraestructura, pues al fundarse en 1987 el Centro de Investigación de Soldadura (CIS), los laboratorios de investigación de la otrora carrera de LF, así como los microscopios electrónicos de barrido y de transmisión que fueran adquiridos en la URSS para el DF, al ya no contar con la carrera de LF, pasaron a formar parte de este nuevo centro, junto a los técnicos de estos laboratorios y profesores del DF, que también se trasladan para el CIS, lo cual provocó una afectación sensible para la docencia de Física en la UCLV, pero sobre todo en la ciencia y técnica del DF, al quedarse éste sin laboratorios para la investigación científica, situación que perdura hasta hoy día [16, 22, 25]. Sin embargo, tal vez el error más significativo no fue cerrar la carrera, sino el pensamiento reduccionista que imperó durante cierto tiempo y que aún perdura en algunas mentes, de que la misión de los físicos del DF era, única y exclusivamente, garantizar la docencia de Física a las carreras de Ciencias Exactas, Técnicas y Agrícolas de la UCLV.

IV. CONCLUSIONES

La UCLV contó desde sus inicios con su Cátedra de Física. La madurez didáctica y metodológica en la enseñanza de la Física en la UCLV se logra a partir de la creación del Departamento de Física de la Escuela de Química, que fuera dirigido por el ilustre profesor Villar Lorenzo, quien jugó un rol determinante en el desarrollo de la Física en esta institución y se convirtió en el paradigma de profesor de Física para varias generaciones de físicos de la UCLV.

La EF de la UCLV primero y el DFM después, lograron

excelentes resultados con reconocimiento nacional, en lo cual fue determinante la asesoría soviética y las posibilidades brindadas por la antigua URSS para la formación de los sus primeros doctores.

El cierre de la carrera de LF en 1985 y el posterior desmantelamiento de la infraestructura investigativa del DF constituyó un error estratégico, afectando sensiblemente el desarrollo de la Física en aquellos años y comprometió su futuro, tanto en la UCLV como en el territorio central del país.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a todos aquellos que accedieron a ser entrevistados para la recolección y contrastación de la información, sin cuyos aportes no hubiere sido posible la escritura de este artículo. Asimismo, agradecen a los trabajadores del Archivo de la UCLV por las facilidades brindadas para la consulta de las fuentes documentales bajo su custodia.

BIIBLIOGRAFÍA

- [1] A. Baracca, J. Reed and H. Wendt, *History of Physics in Cuba*, (Springer, Dordrecht, 2014).
- [2] O. De Melo y M. Sánchez-Colina, *Rev. Cub. Fís.* **29**, 90 (2012).
- [3] J. Altshuler y A. Baracca, *ILUIL* **27**, 557 (2004).
- [4] A. Baracca, V. Fajer y B. Henríquez, *RUISF* enero 2005, 56 (2005).
- [5] A. Baracca, V. Fajer y C. Rodríguez, *Phys. Today* September 2006, 42 (2006).
- [6] F.J. Alfonso López, J. V. López Palacios y M. E. Cruz Rodríguez, *ISLAS* **54**, 171, (2012).
- [7] Consejo Económico, Índice General de Acuerdos 1952-1955, Secciones: Provisión de Cátedras y Facultad de Ingeniería, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas.
- [8] Consejo Universitario, Libro Consejo Universitario, Sesiones ordinarias 18 de junio de 1948 a 10 de febrero de 1954, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas.
- [9] Y. Sarduy Melendres y A. E. Morrell Consuegra, La memoria histórica de la Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas desde el documental televisivo, Trabajo de diploma, UCLV, Santa Clara, (2013).
- [10] Secretaria General, Libro Junta General. Secciones Extraordinarias 1956 – 1957. Actas y sesiones extraordinarias. Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas.
- [11] B. N. Hernández Martínez, N. Castañedo Cancio y G. Fernández Morales, Orígenes y desarrollo de la carrera de Química en la región central de Cuba, Editorial Feijó, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas. ISBN: 978-959-312-406-5, (2020).
- [12] Secretaria General, Libro de Registros de Títulos 1957-1965. Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas.
- [13] J.V. Lorenzo Ginori, Entrevista efectuada por los autores, (2018).

- [14] B. Córdova Ríos y M.D. Rodríguez Palacio, *Prácticas de Mecánica*, Dpto. de Física, Escuela de Química, Universidad Central de Las Villas, (1968).
- [15] O. Valdés Chaviano, Entrevista efectuada por los autores, (2018).
- [16] F. A. Ruiz Martínez, Entrevista efectuada por los autores, (2017).
- [17] Secretaria General, *Libro de Registros de Graduados 1973-1980*. Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas.
- [18] R. Cárdenas-Ortiz, *Obituarios*. Rev. Cub. Fís. **35**, 75 (2017).
- [19] E. Valencia Morales, Entrevista efectuada por los autores, (2017).
- [20] R. Galeano Cisneros, Entrevista efectuada por los autores, (2018).
- [21] J. L. Moya Rodríguez, Entrevista efectuada por los autores, (2018).
- [22] C. de la C. Rodríguez Fadrugas, Entrevista efectuada por los autores, (2018).
- [23] A. Hernández Fereira, Entrevista efectuada por los autores, (2018).
- [24] E. Reguera, F.A. Ruiz Martínez, y A. Duffus Scott, *Caracterización micro-estructural y de las propiedades mecánicas del sistema cobre-aluminio para la cafetera INPUD, Reportes de Aplicación*, Biblioteca Central "Chiqui Gómez Lubián", UCLV, (1979).
- [25] M. García Ramos, Entrevista efectuada por los autores, (2017).
- [26] J. L. García Cuevas, Comunicación privada vía correo electrónico, enero 24, (2021).

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.



CELÉBRASE VII TALLER DE ENSEÑANZA DE LA FÍSICA EN LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE

Entre los días del 6 al 8 de julio de 2022, convocado por los Departamentos de Física Aplicada (DFA) y Física (DF) de la Facultad de Ciencias Naturales y Exactas de la Universidad de Oriente (UO), con el auspicio de la Sociedad Cubana de Física (SCF) se celebró el VII Taller de Enseñanza de la Física, después de un período de tres años de estar postergándose debido a la COVID-19. En esta ocasión fue dedicado a la conmemoración del "Año Internacional de las Ciencias Básicas para el Desarrollo Sostenible". Con relación a esta temática, el Presidente del Grupo de la SCF en Santiago de Cuba, Profesor Consultante del DF MSc. Luis M. Méndez Pérez presentó la ponencia "Enseñanza de la Física vinculada a los Objetivos de Desarrollo Sostenible en el Año Internacional de las Ciencias Básicas", en la que expuso su experiencia en la impartición de la asignatura Optativa "Introducción a la Física de la Atmósfera" donde abordó elementos relacionados con el cambio climático y presentó las adecuaciones de otras asignaturas Optativas y de la Física General.

El Taller tuvo como inicio el póstumo homenaje por parte de la Dra. C. Zucel J. Pérez Ortiz, al recientemente fallecido profesor del DFA y profesor de Física de la UO, MSc. Luis Rodríguez Landrove, desde 1967 hasta 2021.

Participaron profesores e investigadores de los departamentos coauspiciadores, de otras entidades de la UO y de otros centros del país, verbigracia: Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas (UCLV), Universidad de Camagüey, Universidad de Pinar del Río.

Se contó con un total de 30 participantes, presentándose 23 ponencias orales en cinco comisiones y 12 en forma de póster. Los trabajos coincidieron de una forma u otra en el análisis, desde distintas perspectivas, de los métodos en la enseñanza de la física. Entre ellos, se discutió sobre la

metodología durante el trabajo experimental y su influencia en el componente investigativo de los estudiantes, las tecnologías de información y las comunicaciones y su influencia en el proceso de enseñanza aprendizaje, el pensamiento sistémico para contribuir al aprendizaje significativo, etc.



Participantes del VII Taller de Enseñanza de la Física de la Universidad de Oriente.

Se dictaron además los cursos: "Hacia una nueva Didáctica de la Educación Superior: La Interdisciplinariedad Comunicativa. Sus resultados, retos y perspectivas", Dr. C. PT. Jorge Luis Barrera Romero; "Grandes Maestros de Física en Cuba: ejemplos a seguir", MSc. PT. Luis Manuel Méndez Pérez y "El desarrollo del talento y la creatividad desde la resolución de problemas físicos con accionar investigativo", Dr. C. PT. José Raúl Morasén Cuevas. El saldo de este VII Taller se puede considerar positivo por las temáticas abordadas, la profundidad de los debates y el nivel de socialización alcanzado. Esperando que el VIII Taller el próximo año tenga iguales o mejores resultados.

Alexey Cruz-García,
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas,
Universidad de Oriente

¿FÍSICA ROCKERA?



Huecos negros en la Lenin. José Edelstein impartiendo la charla "Huecos negros" en el IPVCE "V.I. Lenin" el 19 de julio de 2022. (Foto: E. Altshuler).

El físico teórico y conocido divulgador de la Física en lengua española José Edelstein-Glaubach (Universidad de Santiago de Compostela, España) nos visitó del 19 al 26 de julio de 2022.

José impartió dos seminarios en el ICIMAF, y también la conferencia divulgativa "Agujeros negros" en el IPVCE "V.I. Lenin" el martes 19 de julio con una asistencia masiva de estudiantes. A pesar de la proximidad del cierre del comedor, las preguntas se extendieron en el tiempo, así como las fotos con el ponente, e incluso la petición de algunos autógrafos: por momentos, sentimos el ambiente de un concierto de rock. La divulgación de la Física se vistió de gala durante aquella semana en nuestra ciudad.

Ernesto Altshuler

LA IUPAP Y EL CLAF CUMPLEN AÑOS

Entre los días 7 y 9 de noviembre del 2022 se realizaron, en el Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF) -Rio de Janeiro, Brasil- las celebraciones por el Centenario de la Unión Internacional de Física Pura y Aplicada (IUPAP) y por el 60 Aniversario del Centro Latinoamericano de Física (CLAF). El evento contó con la presencia de representantes de algunos de los Estados Miembros del CLAF, así como de conferencistas invitados de varias instituciones latinoamericanas tales como el CBPF, el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS), la Asociación Latinoamericana para Altas Energías, Cosmología y Física de Astropartículas (LAAHECAP) todas de Brasil, la Universidad de la República de Uruguay, el Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica de México, la Comisión Chilena de Energía Nuclear – CCHEN y la Universidad de Buenos Aires & CONICET, Argentina.

En el cierre de estas conmemoraciones el Director de CLAF, Dr. Luis Huerta, condujo un “Conversatorio” cuyo tema se enfocó en: “La física y la ciencia en el futuro de América Latina”, y que contó con la participación de los ex directores del CLAF, Dr. Carlos Aragão y Dr. Carlos Trallero, el Director del CBPF, Dr. Márcio Portes de Albuquerque, Eneida Zanqueta representante del MCTI -Brasil y Dra. Silvina Ponce, presidente designada de la IUPAP.

El 10 de noviembre del 2022 se realizó la 19ª Asamblea General del Centro Latinoamericano de Física (CLAF), en Rio de

Janeiro – Brasil. En esta asamblea fueron elegidos los nuevos miembros del Consejo Directivo del CLAF a partir de las propuestas de sus Estados miembros.



Panel sobre “La física y la ciencia en el futuro de América Latina”. De derecha a izquierda: Dr. Carlos Trallero, Dr. Carlos Aragão, Dr. Luis Huerta, Dr. Joao Paulo Sinnecker, Sra. Eneida Zanqueta y Dra. Silvina Ponce.

En el caso de Cuba fueron elegidos para el próximo período de cuatro años, como consejero el Dr. Arbelio Pentón Madrigal (Facultad de Física de la Universidad de La Habana) y como suplente la Dra. Elizabeth Rodríguez Querts (Instituto de Cibernética Matemática y Física, ICIMAF).

*Arbelio Pentón-Madrigal,
Facultad de Física,
Universidad de La Habana*

LA VUELTA DE FOTODINÁMICA

La edición número once del congreso Fotodinámica y Aspectos Relacionados (Photodynamics and Related Aspects) tuvo lugar del 7 al 11 de noviembre en La Habana. Este congreso fue organizado con patrocinio de la Sociedad Cubana de Física y del Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas de la Universidad de La Habana, Instec.

Se celebró en el salón Solidaridad del hotel “Habana Libre” y contó con la participación de 37 invitados de instituciones extranjeras.

El congreso sesionó en Cuba entre los años 2000 y 2010 cada dos años. Luego se trasladó a Latinoamérica y se celebró en Brasil (2012), México (2014), Argentina (2016) y Colombia (2018). La pandemia de COVID 19 interrumpió la celebración de los 20 años de Photodynamics, en La Habana, la cual fue postergada hasta esta ocasión.

Los temas tratados en el congreso fueron:

- Fotodinámica en gases y agregados moleculares: espectro, transferencia de energía y reacciones moleculares.
- Procesos ultrarrápidos (escala temporal de attosegundos).
- Fotodinámica en fase condensada.
- Colisiones ultrafrías.

- Fotodinámica de nano sistemas y de sistemas biológicos.
- Colisiones con superficies.
- Sistemas moleculares de interés astrofísico y astroquímico.
- Control.



Foto de grupo del evento Fotodinámica 2022.

Otras áreas de la universidad participaron en la conferencia a través de charlas y carteles, entre las que se destacan la Facultad de Química, la Facultad de Física y el Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE).

*German Rojas-Lorenzo,
InsTec,
Universidad de La Habana*

EN INVIERNO, LA TERCERA ESCUELA DE VERANO

La 3ra Escuela de Verano ¡Física para Todos! se desarrolló del 14 al 19 de noviembre de 2022. Contó con una matrícula de 39 estudiantes de preuniversitario: 15 de 10mo grado y 23 de 11no grado, provenientes de 7 preuniversitarios de La Habana, 1 de Mayabeque, 1 de Artemisa y 2 de Matanzas. Además, un estudiante de 9no grado, talento del IPVCE “V. I. Lenin” matriculado por excepción.

Los estudiantes tuvieron a disposición cuatro charlas y diez proyectos experimentales, relacionados a continuación.

Charlas

1. El Premio Nobel, los Hippies y la Segunda Revolución Cuántica (Dr. Carlos Rodríguez Castellanos).
2. El gran misterio de la constante h (Dr. Osvaldo de Melo Pereira).
3. Curiosas trayectorias en el plano y en el espacio. ¿Qué nos dice la Geometría Analítica? (Dra. María Teresa Pérez Maldonado).
4. El universo: al infinito y más allá (Dra. Gretel Quintero Angulo).

Proyectos

1. Creación de una red neuronal artificial (Dr. Julio Vidal Larramendi, Lic. Ernel González Quiroga).
2. Espectroscopio por difracción de la luz (Dr. Arbelio Pentón Madrigal, Dra. Beatriz Concepción Rosabal).
3. Arquímedes: la corona para el rey (Dr. Félix Martínez Oliva).
4. Experimentos de óptica: reflexión total interna o la medición de la longitud de onda de la voz (Lic. Alfredo Reyes González).
5. Matemática e impresión 3D (Ing. Orestes Chávez Linares, MIPYME “Espoleta Tenologías”).
6. Densidad de una sustancia granulada (MSc. René Fundora Arencibia).
7. Crecimiento de una capa delgada de Cu por electrodeposición (Dr. Saúl Larramendi Valdés).
8. Velocidad crítica de caída de un cuerpo (Dr. Gustavo Sánchez, Lic. Luis Abel Rodríguez Torner).
9. Constante de gravitación universal (Dr. Alfredo de la Campa García (MSc. Alberto Batista Tomás).
10. Projectiles hidrostáticos (Dr. Lacié Alonso Llanes).

Además, se realizó una visita guiada por varios laboratorios de investigación de la Facultad. Los Proyectos Experimentales se desarrollaron en tríos/cuartetos, a través de los cuales todos los estudiantes fueron evaluados por sus respectivos

profesores a cargo, considerando el interés, desempeño y responsabilidad mostrados en todas las actividades incluidas en cada proyecto.

En el día final de la Escuela se desarrolló una intensa Jornada Científica, en la que cada equipo presentó, ante un tribunal de tres experimentados profesores (que no fueron parte de los proyectos), el trabajo desarrollado. Se evaluaron la presentación, el volumen de trabajo ejecutado, los métodos utilizados, el dominio de los temas abordados, las actividades llevadas a cabo, las respuestas al tribunal y el trabajo colectivo. Todos los equipos fueron evaluados satisfactoriamente, así como cada uno de los estudiantes de forma individual. Se premiaron 3 equipos, como se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1. Premios de la tercera Escuela de Verano

Primer Lugar	
Espectroscopia por difracción de la luz	Anthony Luigi Rodríguez Vázquez
	Alejandro Pellicer Caporte
	Bárbara Lucía Fernández González
	Yosdany Cruz Pentón
Segundo Lugar	
Densidad de una sustancia granulada	María Claudia Argoste Estrada
	German Ortiz Soris
	Giselle Rodríguez Fernández
	Giselle Martín Fernández
Tercer Lugar	
Arquímedes: la corona para el rey	Carolina Dueñas Echeandia
	Michel García Mendoza
	Lázaro Yuniel Fuentes Collazo

Se otorgó la carrera de Licenciatura en Física y el Colegio de 12 grado a 19 estudiantes de 11no grado y 13 de 10mo grado.

Una vez más, la Escuela ha sido una experiencia fantástica, que se caracterizó por el esfuerzo y la entrega de los estudiantes. Todos mostraron una gran motivación por la Física, cualidad fundamental para ser un buen científico.

La Escuela se benefició del apoyo de la dirección de la Universidad de La Habana, la beca del InsTec, Extensión Universitaria de la Universidad de La Habana, el IMRE, la Sociedad Cubana de Física, y claro está, los profesores, trabajadores y estudiantes de la Facultad de Física.

*Aime Peláiz-Barranco,
Decana, Facultad de Física,
Universidad de La Habana*

CELEBRANDO CON SELLOS

El día 23 de noviembre del 2022 fue celebrado el Año internacional de las ciencias básicas para el desarrollo sostenible en el auditorio de la Facultad de Física (FF) de la Universidad de La Habana. La actividad fue organizada por la Sociedad Cubana de Física (SCF) con el auspicio del Museo Postal Cubano (Ministerio de Comunicaciones y del Grupo Empresarial Correos de Cuba). Presidieron la actividad el Dr. Carlos Rodríguez Castellanos (Vicepresidente de la ACC), la Dra. María Sánchez Colina (Presidenta de la SCF), la Dra. Aime Pelaiz Barranco, Decana de la FF – UH y el Lic. Pedro David Aguilar Pérez (Director de Organización y Capital Humano del Grupo Empresarial Correos de Cuba).

En una primera parte de la actividad se exhibió una exposición filatélica sobre momentos y personalidades de las ciencias en Cuba y el mundo, y se realizó la cancelación conmemorativa de una emisión postal. Con esta cancelación quedará para la historia postal y filatélica de nuestro país, la celebración en Cuba del 2022 como Año Internacional de las Ciencias Básicas para el Desarrollo Sostenible, con lo que nos sumamos al empeño de resaltar el papel crucial de las ciencias básicas para el desarrollo sostenible y enfatizar sus contribuciones a la implementación de la Agenda 2030 y al logro de los Objetivos

de Desarrollo Sostenible.



Celebrando con sellos. Izquierda: La Dra. María Sánchez Colina (Presidenta de la SCF) firma en uno de los sobres conmemorativos a la fecha. Derecha: Muestra de uno de los sobres cancelados con una emisión puesta en circulación el 21 de septiembre de 2005, destinada a conmemorar el Aniversario 75 de la Visita de Albert Einstein a Cuba. El caché del sobre muestra el logo que identifica las celebraciones del "Año Internacional de las Ciencias Básicas para el Desarrollo Sostenible 2022". El cuño cancelador en color negro reproduce el logo de la Sociedad Cubana de Física. En el sobre aparecen las firmas de los que presidieron la actividad.

En el cierre de esta celebración el Dr. Carlos Rodríguez Castellanos impartió la charla: El Premio Nobel, los Hippies y la Segunda Revolución Cuántica.

*Arbelio Pentón-Madrigal,
Facultad de Física,
Universidad de La Habana*

