

TESIS DEFENDIDA POR

Emiliano Terán Bobadilla

Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ

Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez

Director del Comité

Dr. Pedro Negrete Regagnon

Miembro del Comité

Dr. Santiago Camacho López

Miembro del Comité

Dr. Ernesto García Mendoza

Miembro del Comité

Dra. Susana Enríquez Domínguez

Miembro del Comité

Dr. Pedro Negrete Regagnon

*Coordinador del programa de
posgrado en Óptica*

Dr. David Hilario Covarrubias Rosales

Director de Estudios de Posgrado

16 de agosto de 2010

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DE
EDUCACIÓN SUPERIOR DE ENSENADA**



**PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS
EN ÓPTICA**

**CONSECUENCIAS DEL ESPARCIMIENTO MÚLTIPLE EN LA
ABSORCIÓN DE ALGUNOS SISTEMAS BIOLÓGICOS**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS

Presenta:

EMILIANO TERÁN BOBADILLA

Ensenada, Baja California, México, Agosto de 2010

RESUMEN de la tesis de **EMILIANO TERÁN BOBADILLA**, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de DOCTOR EN CIENCIAS en ÓPTICA con orientación en ÓPTICA FÍSICA. Ensenada, Baja California, Agosto de 2010.

CONSECUENCIAS DEL ESPARCIMIENTO MÚLTIPLE EN LA ABSORCIÓN DE ALGUNOS SISTEMAS BIOLÓGICOS

Resumen aprobado por:

Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez

Director de Tesis

Los corales pétreos son animales marinos que forman un esqueleto de carbonato de calcio y viven en simbiosis con microalgas fotosintéticas. En consecuencia, la luz juega un papel fundamental en esta simbiosis y en la supervivencia del coral.

En esta tesis, se presentan estudios de la interacción de luz con la estructura de corales constructores de arrecifes, prestando especial atención a las consecuencias del esparcimiento múltiple en el ambiente lumínico en el que viven las algas simbióticas. Para ello, se propone un modelo físico simplificado de un coral y se describe la caracterización óptica de sus componentes. El estudio está basado en simulaciones tipo Monte Carlo de la interacción de luz con el modelo propuesto.

Los resultados muestran que, en un coral bien pigmentado, el campo local de luz en las cavidades del esqueleto es ligeramente mayor que aquel que verían las algas fuera de la estructura. Sin embargo, si el coral pierde pigmentación, el ambiente local de luz puede ser mucho mayor al externo. Esto puede llevar a una situación de estrés lumínico, e incluso daño permanente a las células fotosintéticas. Los resultados son importantes para mejorar nuestra comprensión de la dinámica del fenómeno conocido como “blanqueamiento de corales.”

Palabras Clave: Esparcimiento de luz, Blanqueamiento de corales

ABSTRACT of the thesis presented by **EMILIANO TERÁN BOBADILLA**, in partial fulfillment of the requirements of the degree of DOCTOR IN SCIENCES in OPTICS with orientation in PHYSICAL OPTICS. Ensenada, Baja California, August 2010.

CONSEQUENCES OF MULTIPLE SCATTERING ON THE ABSORPTION OF SOME BIOLOGICAL SYSTEMS

Stony corals are marine animals that form a skeleton of calcium carbonate and live in symbiosis with photosynthetic microalgae. In consequence, light plays a fundamental role in this symbiosis and in the survival of the coral.

In this thesis, we present studies of the interaction of light with the structure of reef-building corals, giving special attention to the consequences of multiple scattering in the light environment in which the symbiotic algae live. For this, we propose a physical model of a coral, and describe the optical characterization of its components. The study is based on the Monte Carlo-type simulation of the interaction of light with the proposed model.

The results show that, in a well-pigmented coral, the local light field in the cavities of the skeleton is slightly higher than the one that the algae would “see” outside the structure. However, if the coral loses pigmentation, the local light field can be much higher than the external one. This can lead to situations of light stress, and even permanent damage of the photosynthetic cells. The results are important to improve our understanding of the dynamics of the phenomenon known as “coral bleaching.”

Keywords: Light scattering, coral bleaching

A mis padres

Ma. del Rosario Bobadilla Diaz

y Lorenzo Terán Olguín

Agradecimientos

A todos los investigadores, estudiantes y personal del departamento de óptica por su enseñanza académica. Al Dr. Eugenio Rafael Méndez Méndez por su valiosa guía y constante apoyo durante todos mis estudios de posgrado.

Al CONACyT, a la Universidad Autónoma de Sinaloa y al Centro de Investigación en Polímeros del grupo COMEX por su apoyo económico.

A mi familia porque gracias a ellos nunca me sentí solo.

A todos las personas que con su compañía, consejos y apoyo me ayudaron a terminar este proyecto. En especial quiero agradecer a la familia Espinoza Torres por su desinteresado apoyo en la última etapa de mi trabajo.

A mis amigos que con su compañía me ayudaron a sortear los malos momentos. Hacer una lista de ellos sería un poco injusto porque su influencia en mi vida no obedece un orden alfabético o cronológico. Sin embargo, quiero agradecer a Victor M. Ortega y Sarahí Arriaga Ramirez por su cuidado y paciencia para revisar este manuscrito.

A las mujeres que me abrieron su corazón y me enseñaron que la vida es más rica y compleja que cualquiera de mis ecuaciones.

Contenido

	Página
Resumen en español	i
Resumen en inglés	ii
Dedicatoria	iii
Agradecimientos	iv
Contenido	v
Lista de Figuras	vii
Lista de Tablas	x
I. Introducción	1
II. La luz en medios no homogéneos	7
II.1 Potencia, irradiancia y flujo	7
II.2 Propiedades ópticas de un medio no homogéneo	10
II.3 La ecuación de transporte de Boltzman	13
II.3.1 La aproximación P_1	16
III. Método Monte Carlo	19
III.1 Breve descripción del método	20
III.1.1 Descripción del programa MCML	21
III.1.2 Sistemas coordenados y normalización de variables	23
III.1.3 Generación de variables aleatorias	25
III.2 Simulación de Monte Carlo para medios no planos	33
III.2.1 Sistemas periódicos bidimensionales	34
III.3 Error estadístico del método	38
IV. Esferas integradoras	42
IV.1 Reseña histórica	43
IV.2 Intercambio de radiación entre superficies difusoras	45
IV.3 Potencia detectadas en términos de las aberturas	47
IV.3.1 Geometría de reflexión	48
IV.3.2 Geometría de transmisión	52
IV.3.3 Incertidumbre en la estimación de la reflectancia	54
IV.3.4 Teoría de errores	55

Contenido (continuación)

	Página
IV.4 Las constantes de la esfera	57
IV.4.1 Incertidumbre en los resultados	59
IV.5 Reflectancia y transmitancia en términos de cocientes de potencias .	60
V. Caracterización óptica del esqueleto de Coral	64
V.1 Descripción del arreglo experimental	65
V.2 Técnica de Monte Carlo inversa	68
V.2.1 El espacio computacional	69
V.2.2 Los valores iniciales	70
V.3 Caracterización de una muestra de teflón	71
V.4 Caracterización del esqueleto de coral	75
VI. Caracterización óptica de las microalgas	79
VI.1 Extinción y absorción	80
VI.1.1 Incertidumbre en la determinación de las secciones transversales	83
VI.2 El factor de anisotropía	85
VI.3 Arreglos experimentales	89
VI.4 Resultados	92
VII. Absorción y esparcimiento de luz en un modelo de coral	95
VII.1 Modelo del coral	95
VII.2 El factor de reforzamiento	98
VII.3 Resultados	100
VIII. Resumen y conclusiones	109
REFERENCIAS	112
Índice	116

Lista de Figuras

Figura		Página
1	Ilustración de la anatomía del coral. Se muestra el esqueleto (estructura blanca en la parte inferior) y el tejido vivo. En el corte del pólipo se ven los tentáculos, la boca y el estómago. En el detalle se muestra un tentáculo y las algas microscópicas.	2
2	Los conceptos de irradiancia y razón de fluencia con iluminación direccional. En el caso de incidencia normal la irradiancia y la fluencia son iguales. Para incidencia oblicua el sensor de irradiancia recibe solamente una fracción de lo que percibe el detector de la razón de fluencia. . . .	8
3	Los conceptos de irradiancia y razón de fluencia. En el caso de iluminación difusa por la parte superior la razón de fluencia será el doble de la irradiancia. Si iluminamos de manera difusa en todas direcciones el detector de irradiancia solamente recibirá la luz por la parte superior. En este caso la razón de fluencia es cuatro veces la irradiancia.	9
4	10
5	Esquema del recorrido de un fotón dentro del medio. Existen tres posibilidades para el fotón al cruzar el medio, que sea reflejado (R), transmitido (T), o totalmente absorbido (A).	22
6	Sistemas coordenados considerados al grabar los valores de absorción. Al lado izquierdo tenemos el sistema coordenado cilíndrico que usa el programa MCML original. Al lado derecho el sistema coordenado cartesiano usado por nosotros.	25
7	Función monótonica	27
8	Método de la transformación. La curva nos muestra la función de fase de Henyey-Greenstein para $g = 0.7$. También se muestra el histograma de los números aleatorios generados por el método de la transformación, para una FDP de HG con $g = 0.7$	30
9	Esquema del método del rechazo.	33
10	Ejemplo de una sección de esqueleto de coral con una geometría similar a la del modelo propuesto.	35

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
11	Esquema del algoritmo usado para la periodicidad del programa MCML*. El ancho del medio está definido por L_x	36
12	Diagrama de flujo del programa de Monte Carlo.	41
13	Diferentes tipos de reflexión y transmisión de luz entre dos medios. . .	43
14	Esquema de una esfera integradora con 3 aberturas. Denotamos la reflectividad de las paredes por m	44
15	Intercambio del flujo entre dos elementos de área dentro de una cavidad esférica.	47
16	Geometría de reflexión. Diagrama esquemático de una esfera integradora. Incidencia difusa (a) y directa (b) sobre la muestra A_δ es el área que ocupa el detector y A_s el área de la muestra.	48
17	Geometría de transmisión. Arreglo esquemático de una esfera integradora. Incidencia directa (a) y difusa (b). Ver pie de figura de la figura 16	52
18	Esqueletos de coral. Los tamaños pueden variar pero la separación entre septos es de alrededor de 1 mm.	65
19	Arreglo esquemático de una esfera integradora con tres haces incidentes.	67
20	Mapa de reflectancia y transmitancia.	71
21	Espectro de reflectancia de las muestras de teflón.	73
22	Espectro de transmitancia de las muestras de teflón.	73
23	Espectro de absorción de las muestras de teflón.	74
24	Propiedades ópticas del esqueleto de coral (muestra Y).	77
25	Fotografía de las microalgas simbióticas <i>S. kawagutii</i> . La barra tiene una longitud de 10 μm	80
26	Esquema de la interacción entre la luz y un medio con partículas. La potencia incidente se denota por P_o , la potencia absorbida por P_a y la componente coherente por P_c	81
27	Comparación entre los valores de f y b con la aproximación $x \simeq \pm 1$ (línea recta) y con la función de fase de Henyey-Greenstein.	88

Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página
28 Diagrama esquemático de un arreglo experimental para medir la sección transversal de extinción.	89
29 Diagrama esquemático de un arreglo experimental para medir la absorción.	91
30 Propiedades ópticas de reflectancia (R), transmitancia (T) y absorción (A) de las celulas <i>S. kawagutti</i>	92
31 Secciones transversales de absorción (C_a), esparcimiento (C_s) y extinción (C_e) de las microcélulas <i>S. kawagutti</i>	93
32 Ilustración de la naturaleza básica de un coral. (a) Coral con los tentáculos retraídos. (b) Coral con los tentáculos extendidos. (c) Esqueleto de coral. (d) Algas simbióticas <i>S. kawagutti</i> . La longitud de la marca de es $10\ \mu\text{m}$	96
33 Diagrama esquemático del modelo de coral considerado.	97
34 Esquema de la geometría considerada por el factor de reforzamiento.	100
35 Absorción como función de la profundidad.	101
36 Sensibilidad del factor de reforzamiento a los parámetros de la geometría considerada en la figura 33.	104
37 Reflectancia de un coral como función de la densidad superficial de las células.	105
38 El factor de reforzamiento ϵ como una función del número de células por área proyectada η para las diferentes estructuras.	106
39 Factor de reforzamiento como una función del coeficiente de absorción del esqueleto μ_a . (a) Coral bien pigmentado con $\eta = 10^6$ células/cm ² y, (b) coral blanqueado con $\eta = 10^5$ células/cm ² . La curva continua corresponde al modelo de coral y la curva punteada al modelo del coral plano. La curva de trazos y puntos en (a) es la reflectancia del esqueleto plano como una función de μ_a . La línea delgada vertical corresponde a $\mu_a = 0.5\text{cm}^{-1}$	108

Lista de Tablas

Tabla		Página
I	1.75.5 Parámetros típicos de la esfera y una muestra utilizada.	56
II	1.75.5 Propiedades ópticas inherentes de una muestra de teflón.	75
III	1.75.5 Propiedades ópticas inherentes de esqueletos de coral ($\lambda = 632$ nm). 78	
IV	Parámetros empleados para los cálculos con el coral plano.	102
V	Resultados de absorción para los modelos estudiados.	103

Capítulo I

Introducción

Los corales pétreos (*scleractinia*) o corales escleractíneos son animales coloniales caracterizados por su habilidad para formar esqueletos duros de carbonato de calcio. La parte del animal es la capa suave y relativamente delgada de material vivo que cubre el esqueleto. Típicamente el pólipo del coral tienen una simetría radial con un cuerpo en forma de columna y una boca rodeada por un anillo de tentáculos que pueden retraerse en las cavidades del esqueleto (ver figura 1). Dentro de las células del tejido animal viven algas simbióticas que proveen nutrientes al coral y lo asisten en el proceso de calcificación. Estas algas dinoflageladas también son las que le dan al coral sus colores característicos.

Los corales pertenecen al filum de los cnidarios, el cual incluye a las medusas, hidroides y anémonas. Algunos son solitarios, pero la mayoría de los corales constructores de arrecifes son organismos coloniales. Existen en una gran variedad de formas y tamaños, con diferencias no sólo a nivel de la colonia, si no también a nivel de los pólipos individuales. Los pólipos individuales están claramente definidos en algunas especies, pero son difíciles de discernir en otras, ya que el tejido que conecta los pólipos, cenosarco adquiere mayor importancia que cada uno de los individuos de la colonia.

Los arrecifes formados por corales pétreos constituyen las estructuras biogénicas más grandes en nuestro planeta. Cabe decir que los corales viven en aguas tropicales y subtropicales que son bajas en nutrientes, y su evolución y éxito ecológico se deben a la simbiosis entre las algas y el animal. Las algas simbióticas ayudan al coral con sus

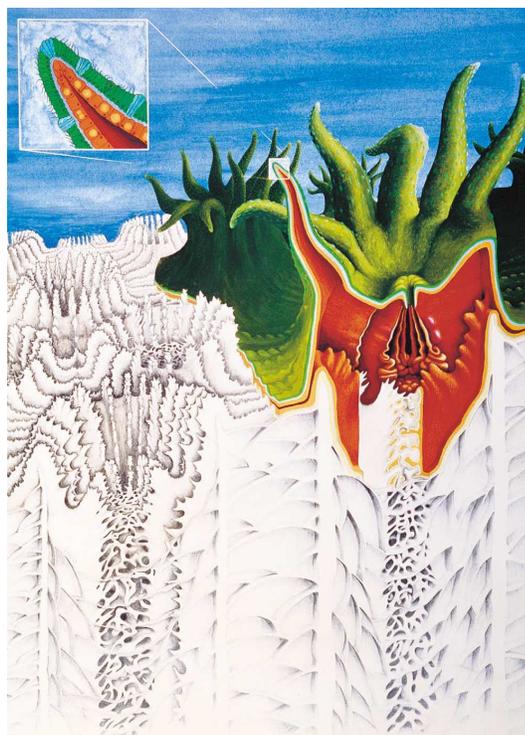


Figura 1. Ilustración de la anatomía del coral. Se muestra el esqueleto (estructura blanca en la parte inferior) y el tejido vivo. En el corte del pólipo se ven los tentáculos, la boca y el estómago. En el detalle se muestra un tentáculo y las algas microscópicas.

requerimientos metabólicos basales producidos por medio de la fotosíntesis, remueven productos de desperdicio, y apoyan la elevada tasa de calcificación característica de estos organismos (Muscatine y Weis, 1992; Goreau y Goreau, 1959). La fotosíntesis de las algas simbiotas es por tanto un proceso clave para el crecimiento de los corales, por lo que contar con sistemas eficientes de colección de luz que les permita a las algas simbiotas un eficiente uso fotosintético de la energía solar, es esencial para la supervivencia del coral y el mantenimiento de la estructura arrecifal.

Aunque la asociación entre los corales y las células fotosintéticas ha sobrevivido durante un largo periodo de la historia evolutiva de la vida de este planeta (desde el triásico (Stanley, 2003)), no es tan robusta como se podría pensar. Pequeñas anomalías térmicas, como un incremento de un par de grados Celsius en la temperatura prome-

dio del verano, pueden hacer que la relación simbiótica se rompa y el coral expulse y pierda sus algas simbiontes y su pigmentación. El fenómeno, conocido como blanqueamiento de coral (Brown, 1997; Hoegh-Guldberg, 1999), es causado por la pérdida de simbiontes y/o por la reducción de los pigmentos fotosintéticos a nivel celular. En años recientes, eventos masivos de blanqueamiento de coral se han incrementado en severidad, extensión y frecuencia, en lo que se ha considerado una de las primeras y más serias evidencias del calentamiento global. El blanqueamiento del coral puede ser reversible, recuperándose la relación simbiótica y la población de algas una vez que la anomalía térmica haya terminado, pero dependiendo de la severidad y la duración del estrés térmico, puede producir una mortandad masiva del coral con consecuencias ecológicas catastróficas (Brown, 1997; Hoegh-Guldberg *et al.*, 2007). Aunque el blanqueamiento del coral parece estar inducido por efectos de la temperatura, una vez que la fotosíntesis es afectada, la luz juega un papel relevante en la severidad del daño y su efecto sobre la ruptura de la simbiosis (Iglesias-Prieto *et al.*, 1992; Warner *et al.*, 1999). En situaciones de estrés lumínico, el exceso de energía que es colectada por las membranas fotosintéticas de las células simbióticas debe ser disipado en forma de calor por vías no fotoquímicas. Si los mecanismos de fotoprotección están saturados, las elevadas tasas de formación de radicales libres y especies altamente oxidantes pueden producir un grave daño en el aparato fotosintético de las algas simbiontes, pero también en el tejido circundante del animal (Lesser, 1996). Por esto, es importante mejorar nuestro entendimiento de la fotobiología de los corales y del campo lumínico en el que viven las algas simbiontes dentro del tejido de coral, para conocer la diversidad de potenciales respuestas que pueden ofrecer los corales bajo condiciones normales.

En un estudio comparativo previo, en el que se analizó la variación de la capacidad y eficiencia de absorción de luz del tejido de coral intacto de la especie *Porites branerii*,

en función de la variación de la sección transversal de pigmentos (las muestras fueron colectadas durante un evento de blanqueamiento y su posterior recuperación en una laguna arrecifal en el Caribe mexicano por lo que se contó con un rango de variación en pigmentación muy amplio, Enríquez *et al.* (2005)) se concluyó que las algas que viven dentro de un tejido vivo de coral pueden percibir hasta cinco veces más luz que aquellas que viven fuera. Una consecuencia evidente de estos resultados es que, además de su función tradicionalmente aceptada como elemento de sustrato y estructura para el tejido del animal, el esqueleto juega un papel muy importante en la iluminación de los simbioses. Es claro que para un entendimiento más completo de los aspectos ópticos del fenómeno de blanqueamiento de coral, es necesario un estudio detallado de los procesos de absorción y esparcimiento que toman lugar dentro de la estructura compleja que involucra al esqueleto de coral, el tejido animal y las algas unicelulares.

La interacción de la luz con medios no homogéneos, como el esqueleto del coral, es un problema cotidiano y que ha sido estudiado desde hace tiempo. Desde de un punto de vista teórico, el problema se ha abordado a lo largo de dos grandes vertientes: los métodos rigurosos y los métodos heurísticos.

Los métodos rigurosos o analíticos se basan en las ecuaciones de Maxwell. En ellas se introducen las propiedades ópticas y estadísticas de los medios y se obtienen expresiones para cantidades estadísticas como el promedio, la varianza o las funciones de correlación del campo. El procedimiento puede considerarse riguroso ya que, en un principio, todos los efectos de esparcimiento, difracción e interferencia pueden ser incluidos. Sin embargo, es difícil llegar muy lejos a lo largo de esta línea y, en algún momento, se tiene que recurrir a aproximaciones. Esto restringe la validez de los resultados a un rango específico de parámetros.

La teoría de transporte, por otro lado, no empieza con la ecuación de onda. En ésta

se hacen consideraciones sobre el transporte de energía en un medio con partículas o heterogeneidades. Se trata de una teoría heurística en la que se desprecian los efectos de interferencia entre las ondas esparcidas. La justificación de esto se basa en la idea de que al promediar sobre configuraciones, o sobre longitudes de onda, los efectos de interferencia desaparecen, de manera que puede uno considerar sumas en intensidad en lugar de sumas de amplitudes de los campos esparcidos.

La teoría de transporte, también llamada teoría de transferencia radiativa, fue iniciada por Schuster (1905). La ecuación íntegro-diferencial básica se conoce como la ecuación de transferencia radiativa y su forma más conocida fue establecida por Chandrasekhar (1947, 1960). Es similar a la ecuación de Boltzmann (también conocida como la ecuación de colisión de Maxwell-Boltzmann) usada en la teoría cinética de los gases y en la teoría de transporte de neutrones¹. Esta manera de proceder ha sido empleada con éxito en una gran variedad de problemas, como en estudios de visibilidad atmosférica, iluminación en medios acuáticos y biológicos, en óptica de papeles y pinturas, y en el intercambio de energía radiativa en la atmósfera de planetas, estrellas y galaxias.

Otra técnica que, aunque de naturaleza distinta, puede ser considerada dentro de esta vertiente (superposición con base en intensidad) es la llamada simulación de Monte Carlo para la propagación de fotones en el medio (Wang y Jacques, 1992; Wang *et al.*, 1995). Cabe resaltar que, más que la propagación de fotones, con esta técnica se realiza un trazo de rayos a través del medio, suponiendo ciertas propiedades estadísticas para la interacción y absorción de la luz en el medio.

Este trabajo está enfocado en entender el ambiente lumínico en el que viven los simbioses fotosintéticos de los corales, usando un modelo simplificado de un coral. De-

¹Gracias a esta equivalencia, los resultados de la teoría de transporte de neutrones son aplicables directamente a la teoría de transferencia radiativa.

scribimos los procedimientos empleados para la estimación de las propiedades ópticas macroscópicas de los diferentes medios involucrados y estudiamos la estructura completa, poniendo énfasis en los aspectos asociados a la absorción de las algas. Debido a la versatilidad de la técnica, decidimos proceder por medio de una simulación tipo Monte Carlo a estudiar la interacción de la luz con el coral. El trabajo está motivado por la necesidad de contar con resultados cuantitativos sobre el papel que juega el esqueleto en la definición del ambiente de luz en que viven los simbioses y las propiedades de absorción del coral, además de la necesidad de entender la óptica involucrada en el fenómeno de blanqueamiento.

La tesis está organizada de la siguiente manera. Este primer capítulo es introductorio; se describe el problema que trataremos y la forma en que pretendemos resolverlo. En el segundo capítulo se presentan los principios básicos de la interacción de la luz con medios no homogéneos y algunos conceptos importantes que utilizaremos a lo largo de la tesis. En el tercer capítulo se describe el método de Monte Carlo que utilizamos para estudiar la interacción de la luz con el coral. En el cuarto y quinto capítulo presentamos la teoría de la esfera integradora y las mediciones experimentales que nos permitirán determinar las propiedades ópticas del esqueleto de coral. En el sexto capítulo se describe la metodología experimental utilizada para estimar las propiedades ópticas de las microalgas. Con base en los resultados obtenidos en estos capítulos, en el capítulo siete presentamos los estudios de absorción y esparcimiento con estructura completa, lo que nos permite evaluar el campo lumínico que ven las microalgas que viven en el coral. Finalmente, se presentan las conclusiones de la tesis.

Capítulo II

La luz en medios no homogéneos

En este capítulo presentamos algunos conceptos importantes utilizados en la tesis. Empezaremos haciendo una revisión de las cantidades radiométricas que usaremos y definiremos las propiedades ópticas que describen la propagación y absorción en un medio no homogéneo. Finalmente, partiendo de la ecuación de transporte radiativo, llegamos a la definición del parámetro conocido como el coeficiente de esparcimiento reducido.

II.1 Potencia, irradiancia y flujo

Una cantidad con la que estamos acostumbrados a trabajar en óptica es la potencia óptica, la cual está definida como energía por unidad de tiempo. La unidad de energía en el sistema internacional es el Joule (J) y la potencia tiene unidades de Joule por segundo o Watt (W). También es importante considerar la potencia normalizada por unidades de área o volumen (densidad de energía o densidad de potencia). Sin embargo, si escribimos una cantidad expresada en “ W/m^2 ” es necesario dar una explicación más detallada de lo que se trata, pues no es claro qué tipo de área estamos considerando; si es plana o curva, y si la sección transversal es plana cuál es su orientación.

La mayoría de los sistemas de medición se calibran usando luz con una dirección definida (es decir, luz colimada). Sin embargo, frecuentemente la luz ambiente que reciben los sistemas biológicos, como plantas, algas o microcélulas, no es luz colimada. Si el cielo está despejado, hay rayos que vienen directamente del sol y que se pueden considerar colimados, pero también hay luz que es reflejada por la superficie del suelo

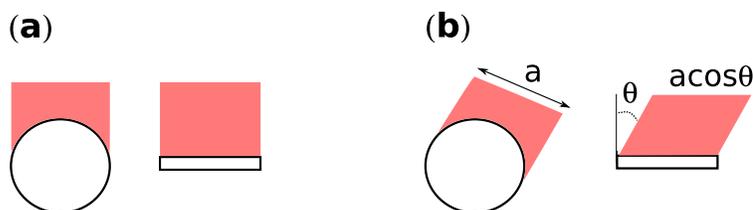


Figura 2. Los conceptos de irradiancia y razón de fluencia con iluminación direccional. En el caso de incidencia normal la irradiancia y la fluencia son iguales. Para incidencia oblicua el sensor de irradiancia recibe solamente una fracción de lo que percibe el detector de la razón de fluencia.

y otros objetos. La iluminación sobre un objeto termina siendo una mezcla de las dos.

Por otro lado, la mayoría de los dispositivos de medición de la luz tienen una superficie de detección plana, y cuando utilizamos el instrumento colocamos esta superficie perpendicular a la dirección de iluminación. Considerando que la mayoría de los sistemas biológicos no son planos y son iluminados por luz que viene en todas direcciones, es importante contar con detectores que sean insensibles al ángulo de incidencia. Esto nos lleva a distinguir entre

1. *Irradiancia*, que es la potencia incidente en una superficie plana de área unitaria.
2. *La razón de fluencia energética* (o razón de fluencia), que es la potencia incidente sobre una esfera de sección transversal unitaria. El término fluencia fue definido por primera vez por Rupert (1974).

En las figuras 2 y 3 se ilustran los conceptos de irradiancia y fluencia en diferentes situaciones.

En la figura 2 (a) tenemos *luz colimada incidiendo perpendicularmente* al plano del detector de irradiancia. En este caso la superficie unitaria y la esfera de sección transversal de área unitaria interceptarán el haz de luz de forma equivalente y la irradiancia será la misma que la razón de fluencia.

En la figura 2 (b) se ilustra el caso en el que tenemos *luz colimada que hace un*

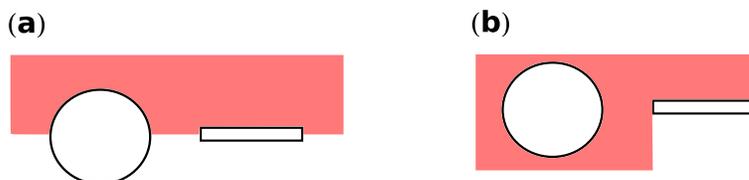


Figura 3. Los conceptos de irradiancia y razón de fluencia. En el caso de iluminación difusa por la parte superior la razón de fluencia será el doble de la irradiancia. Si iluminamos de manera difusa en todas direcciones el detector de irradiancia solamente recibirá la luz por la parte superior. En este caso la razón de fluencia es cuatro veces la irradiancia.

ángulo θ con respecto a la normal al plano del detector de irradiancia. En este caso la luz interceptada por la superficie plana de área unitaria es menor que la interceptada por la esfera de sección transversal unitaria. La irradiancia y la razón de fluencia diferirán por un factor de $\cos\theta$. Debido a que $\cos\theta$ es menor que la unidad, en este caso la irradiancia será menor que la razón de fluencia.

En la figura 3 (a) se ilustra el caso de *luz difusa incidiendo por el hemisferio superior parte superior*. En este caso la irradiancia será la mitad de la fluencia.

Finalmente, en la figura 3 (b) mostramos el caso de *luz difusa incidiendo de manera isotrópica*. La esfera es iluminada en todas direcciones pero la superficie plana sólo recibe luz del hemisferio superior. En este caso la irradiancia es un cuarto de la razón de fluencia. Es posible ver esto recordando que el área de un círculo es un cuarto del área de la esfera con el mismo radio.

Hasta el momento sólo hemos tratado con luz incidente sobre una superficie, ya sea plana o esférica. Sin embargo, necesitamos considerar otras cantidades. Por ejemplo la potencia total de salida de una fuente de luz que, por supuesto, medimos en Watts. La potencia de emisión por unidad de área de la fuente es llamada la *excitancia radiativa* y se mide en W/m^2 (similarmente a la irradiancia y la razón de fluencia). La potencia de emisión puede estar distribuida en diferentes direcciones; de manera que también es interesante especificar la potencia de emisión por estereoradian. Esta cantidad es

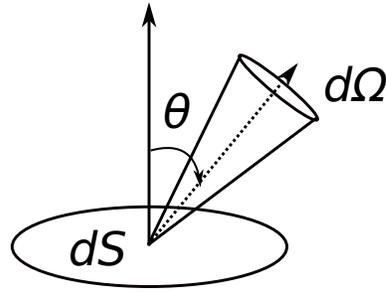


Figura 4.

llamada la *intensidad radiativa* en esa dirección y se mide en $W/strad$. La intensidad radiativa por unidad de área en un plano perpendicular a la dirección de propagación de la luz es llamada *radiancia* y su unidad es W/srm^2 . La radiancia (que usualmente se denota por L) es la potencia radiante P que es emitida por un elemento de área dS en un ángulo sólido $d\Omega$, que está centrado en una dirección especificada por un ángulo θ (ángulo entre la normal a dS y la dirección de observación). Con referencia a la figura 4, podemos escribir que

$$L = d^2P/d\Omega dS \cos \theta. \quad (1)$$

Si integramos la radiancia sobre todas las direcciones (4π radianes), obtenemos la razón de fluencia que ya hemos mencionado.

II.2 Propiedades ópticas de un medio no homogéneo

Consideremos ahora la interacción de la luz con un medio no homogéneo compuesto por partículas separadas entre sí una distancia suficientemente grande para tener esparcimiento independiente (más de 3 veces el radio de las partículas (VandeHulst, 1981)).

Supongamos que la iluminación direccional (colimada) tiene una irradiancia I_o . Claramente, si consideramos solamente procesos lineales de absorción, la potencia ab-

sorbida será proporcional a la irradiancia incidente. Es decir que,

$$P_a = C_a I_o, \quad (2)$$

donde hemos denotado por C_a al coeficiente de proporcionalidad entre la potencia y la irradiancia. Esta cantidad tiene unidades de área, por lo que es conocida como la sección transversal de absorción. De manera similar la potencia esparcida se puede escribir como

$$P_s = C_s I_o, \quad (3)$$

donde C_s es la sección transversal de esparcimiento. Otra cantidad relevante es la sección transversal de extinción, que está dada por la suma de las secciones transversales de absorción y esparcimiento. Es decir que $C_e = C_s + C_a$.

Ahora consideremos una haz de irradiancia I y sección transversal C_b , que incide sobre una rebanada de un medio no homogéneo de espesor Δz . Aunque no es estrictamente necesario por simplicidad suponemos que el haz tiene irradiancia uniforme dentro de su sección transversal. El volumen de medio iluminado es V y contiene $N = \rho V$ partículas, donde ρ es la densidad volumétrica. Suponiendo que la densidad de partículas es suficientemente baja para que en esta rebanada de ancho Δz no ocurran procesos de esparcimiento múltiple, cada partícula absorbe una potencia $C_a I_o$ y esparce una potencia $C_s I_o$. Entonces la potencia que pierde el haz al pasar a través del medio es

$$\begin{aligned} P_e &= N C_e I_o \\ &= \rho C_e dz P_o. \end{aligned} \quad (4)$$

Dividiendo entre la sección transversal del volumen considerado encontramos la re-

ducción de la irradiancia del haz al pasar a través del medio,

$$\Delta I = \rho C_e \Delta z I_o. \quad (5)$$

En este momento, es conveniente definir $\mu_t = \rho C_e$, que llamaremos el coeficiente de interacción y tiene unidades de longitud⁻¹. Con esto, podemos escribir la siguiente ecuación diferencial,

$$dI = -\mu_t I dz. \quad (6)$$

Vemos entonces que μ_t representa una propiedad del medio que, a través de la expresión $\mu_t = \rho C_e$, podemos relacionar con las propiedades de las heterogeneidades.

Podemos escribir el coeficiente de interacción en términos de las propiedades de absorción y esparcimiento de las partículas,

$$\begin{aligned} \mu_t &= \rho C_e \\ &= \rho C_s + \rho C_a \\ &= \mu_s + \mu_a \end{aligned} \quad (7)$$

donde los coeficientes de absorción y esparcimiento se denotan por μ_a y μ_s , respectivamente. Estas cantidades representan la probabilidad de que el fotón sea absorbido o esparcido por unidad de longitud y se pueden escribir en términos de las propiedades de las partículas como,

$$\mu_a = \rho C_a, \quad (8)$$

y

$$\mu_s = \rho C_s. \quad (9)$$

II.3 La ecuación de transporte de Boltzman

Una descripción ampliamente aceptada de la propagación de la luz en medios no homogéneos es la ecuación de transporte de Boltzman (Ishimaru, 1978)

$$\frac{1}{c} \frac{\partial L(\mathbf{r}, \hat{s}, t)}{\partial t} = -\hat{s} \cdot \nabla L(\mathbf{r}, \hat{s}, t) - \mu_t L(\mathbf{r}, \hat{s}, t) + \mu_s \int_{4\pi} L(\mathbf{r}, \hat{s}', t) f(\hat{s}, \hat{s}') d\Omega' + S(\mathbf{r}, \hat{s}, t). \quad (10)$$

En esta ecuación, L representa la radiancia en la posición \mathbf{r} emitiendo, en la dirección \hat{s} al tiempo t , c es la velocidad de la luz en el medio, $f(\hat{s}, \hat{s}')$ representa la función de fase, que es una función de densidad de probabilidad que describe los cambios en la dirección de los fotones entre \hat{s}' y \hat{s} , siendo la distribución de fuentes $S(\mathbf{r}, \hat{s}, t)$ con dimensiones de potencia por unidad de volumen por unidad de ángulo sólido.

El término del lado izquierdo de la ecuación de transporte representa la tasa de cambio temporal de la radiancia. En el lado derecho, el primer término describe el decremento del flujo a lo largo de \hat{s}' , el segundo término la absorción dentro del elemento de volumen o el esparcimiento fuera de la dirección \hat{s} , el tercer y cuarto término representan el incremento en la radiancia por esparcimiento en la dirección de \hat{s} , de cualquier otra dirección \hat{s}' o de la introducción de fotones por fuentes. La ecuación de transporte es una descripción heurística del transporte de luz, que trata a los fotones como partículas sometidas a colisiones elásticas aleatorias o eventos de absorción. Los efectos de coherencia y polarización son ignorados en esta representación de la ecuación de transporte.

Debido a que es muy difícil obtener soluciones analíticas para esta ecuación integro-diferencial, excepto para geometrías y fuentes con distribuciones sencillas, como medios infinitos plano, se han desarrollado estrategias para obtener soluciones aproximadas. Probablemente el método más común es la secuencia de aproximaciones que desemboca

en la llamada aproximación P_n . La descripción de esta aproximación está basada en el desarrollo presentado por Hull (1986) y parcialmente en las de Ishimaru (1978), Case y Zweifel (1967), Davison (1958) y Boas (1996).

En la aproximación P_n , las cantidades angulares en la ecuación (10) se desarrollan en términos de armónicos esféricos Y_{lm} . La razón de adoptar estas funciones se debe básicamente a que en medios no homogéneos en los que el esparcimiento múltiple es dominante se espera que el campo de luz sea prácticamente isotrópico. La radiancia y la distribución de fuentes se escriben como

$$L(\mathbf{r}, \hat{s}, t) = \sum_{l=0}^N \sum_{m=-l}^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \phi_{lm}(\mathbf{r}, t) Y_{lm}(\hat{s}) \quad (11)$$

y

$$S(\mathbf{r}, \hat{s}, t) = \sum_{l=0}^N \sum_{m=-l}^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sigma_{lm}(\mathbf{r}, t) Y_{lm}(\hat{s}), \quad (12)$$

donde ϕ_{lm} y σ_{lm} son los momentos de la radiancia y la distribución de fuentes, respectivamente.

Los valores $\phi_{0,0}$ y $\phi_{1,m}$ están relacionados con la fluencia y flujo de fotones (o densidad de corriente). La fluencia es una componente isotrópica de la radiancia, definida por

$$\begin{aligned} \Phi &= \int_{4\pi} L(\mathbf{r}, \hat{s}, t) d\Omega \\ &= \sum_{l=0}^N \sum_{m=-l}^l \phi_{lm} \int_{4\pi} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} Y_{lm}(\hat{s}) d\Omega \\ &= \phi_{0,0}. \end{aligned} \quad (13)$$

El flujo está definido como

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \int_{4\pi} L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) \hat{\mathbf{s}} d\Omega \\
&= \sum_{l=0}^N \sum_{m=-l}^l \phi_{lm} \int_{4\pi} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} Y_{lm}(\hat{\mathbf{s}}) [\sin \theta \cos \phi \hat{x} + \sin \theta \sin \phi \hat{y} + \cos \theta \hat{z}] d\Omega \\
&= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{l=0}^N \sum_{m=-l}^l \phi_{lm} \int_{4\pi} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} Y_{lm}(\hat{\mathbf{s}}) [\sin \theta \cos \phi \hat{x} + \sin \theta \sin \phi \hat{y} + \cos \theta \hat{z}] d\Omega \\
&= \sqrt{\frac{1}{2}} (-\phi_{1,1} + \phi_{1,-1}) \hat{x} - \sqrt{\frac{1}{2}} (\phi_{1,1} + \phi_{1,-1}) \hat{y} + \phi_{1,0} \hat{z}.
\end{aligned} \tag{14}$$

Se puede ver que las componentes cartesianas del flujo están dadas por una combinación lineal de los términos $\phi_{l,m}$ en la ecuación (11).

Bajo la suposición de que la amplitud del esparcimiento es dependiente del ángulo de esparcimiento, pero independiente de su localización espacial en el medio y de la dirección $\hat{\mathbf{s}}$ del haz incidente, se puede expresar la función de fase en términos de polinomios de Legendre en el ángulo de esparcimiento:

$$f(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}') = \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{4\pi} g_l P_l(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}'), \tag{15}$$

donde P_l es un polinomio de Legendre de orden l . La función de fase está normalizada, de modo que $g_0 = 1$ y g_1 es el promedio del coseno del ángulo de esparcimiento, que es conocido como el factor de anisotropía y normalmente se denota por g .

La función de fase más comúnmente usada para modelar esparcimiento en tejidos biológicos es la función de fase de Henyey y Greenstein (1941),

$$f(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}') = f(\cos \theta) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{1 + g^2 - 2g \cos \theta}. \tag{16}$$

No hay una razón física para utilizar esta función de fase, pero se trata de una función conveniente en varios aspectos. Es interesante notar que, para la función de fase de

Henye-Greenstein, $g_l = g_1^l$. Así, todos los momentos de la función de fase de Henye-Greenstein están determinados por su primer momento.

La aproximación P_n de la ecuación de transporte se obtiene truncando la expansión en las ecuaciones (11), (12) y (15) en $l = n$, donde n es el orden de la aproximación. El conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas puede entonces ser resuelto para determinar los momentos correspondientes de la radiancia. Con aproximaciones de más alto orden obtenemos modelos más precisos para una anisotropía mayor en la radiancia, lo cual permite considerar fuentes y fronteras más cercanas.

II.3.1 La aproximación P_1

En la aproximación P_1 , la radiancia, el término de la fuente, y la función de fase, pueden ser escritos como la suma de un término isotrópico y un término anisotrópico lineal:

$$L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) = \frac{1}{4\pi}\Phi(\mathbf{r}, t) + \frac{3}{4\pi}\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (17)$$

$$S(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, t) = \frac{1}{4\pi}S_0(\mathbf{r}, t) + \frac{3}{4\pi}S_1(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (18)$$

y

$$f(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}') = \frac{1}{4\pi} + \frac{3}{4\pi}g_1\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}'. \quad (19)$$

En estas expresiones, S_0 y S_1 están relacionados con los momentos monopolar y dipolar de la fuente, de una manera análoga a las relaciones en las ecuaciones (13) y (14).

Sustituyendo las ecuaciones (17), (18) y (19) en la ecuación (10), e integrando sobre todo los ángulos sólidos, encontramos una ecuación diferencial que involucra a Φ y \mathbf{j} :

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\mathbf{r}, t) + \mu_a\Phi(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = S_0(\mathbf{r}, t). \quad (20)$$

Encontramos una segunda ecuación multiplicando la ecuación (10) por $\hat{\mathbf{s}}$ e inte-

grando sobre todos los ángulos:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + (\mu'_s + \mu_a) \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{3} \nabla \Phi(\mathbf{r}, t) = S_1(\mathbf{r}, t). \quad (21)$$

Tomando la divergencia de 21, estas ecuaciones pueden ser desacopladas, con lo que se encuentra una ecuación individual para Φ :

$$\begin{aligned} -D \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, t) + c \mu_a \Phi(\mathbf{r}, t) &+ \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{3D}{c} \left[\mu_a \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} \right] \\ &= c S_0(\mathbf{r}, t) - 3D \nabla \cdot S_1(\mathbf{r}, t) + \frac{3D}{c} \frac{\partial S_0}{\partial t}, \end{aligned} \quad (22)$$

donde $D = \frac{c}{3(\mu_a + \mu'_s)}$ se conoce como el coeficiente de difusión y $\mu'_s = \mu_s(1 - g)$. La ecuación (22) constituye la aproximación P_1 a la ecuación de transferencia radiativa.

Coeficiente de esparcimiento reducido: μ'_s

Notemos que en la aproximación P_1 el coeficiente de esparcimiento siempre aparece multiplicado por un factor $1 - g$. Este producto es llamado el coeficiente de esparcimiento “reducido” o de “transporte”. El hecho de que μ_s siempre entre en la aproximación P_1 de esta manera indica que, en situaciones donde la aproximación P_1 es válida (frentes lejanos y fuentes isotrópicas), el esparcimiento anisotrópico puede ser modelado como esparcimiento isotrópico, pero con un coeficiente de esparcimiento reducida por un factor de $1 - g$. Entonces, cuando trabajamos con medios en los que domina el esparcimiento múltiple es costumbre describir sus propiedades ópticas un medio en términos de sus propiedades ópticas “reducidas”, definidas por:

$$\begin{aligned} \mu'_s &= \mu_s(1 - g) \\ \mu'_t &= \mu'_s + \mu_a \\ a' &= \frac{\mu'_s}{\mu'_s + \mu_a}. \end{aligned} \quad (23)$$

Aquí, μ'_t es el coeficiente de extinción total reducido y a' es el albedo reducido. Otras cantidades de interés son el camino libre medio $l = 1/\mu_s$ y el camino libre medio de transporte $l^* = 1/\mu'_s$. La descripción del transporte óptico usando estas propiedades reducidas constituye una aplicación del principio de similitud, que se discute con detalle en el artículo de Star *et al.* (1988).

Capítulo III

El método de Monte Carlo

Un experimento muy antiguo que ilustra la idea básica del cálculo de Monte Carlo es el de la “aguja de Buffon” (Ramaley, 1900), realizado originalmente por Georges Louis Leclerc, Comte de Buffon en 1777. En este experimento, se arroja una aguja de longitud l sobre una superficie plana en la que se ha trazado una malla de líneas paralelas separadas entre sí por una distancia D (con $D > l$). La probabilidad de que una aguja intersecte una de las líneas es $\frac{2l}{\pi D}$. Si repetimos el experimento N veces, la fracción de veces que una aguja intersecta una línea será P_n . Podemos entonces estimar el valor de π como

$$\pi = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2l}{P_n D}. \quad (24)$$

Este ejemplo ilustra un procedimiento más general que nos permite calcular ciertas cantidades de interés por medio de experimentos que involucran procesos aleatorios. Este tipo de experimentos numéricos se han convertido en parte importante del cómputo científico.

El uso sistemático del método de Monte Carlo para resolver problemas científicos apareció desde los inicios de la computación electrónica (1945-55) y, durante la segunda Guerra Mundial, permitió el desarrollo de la primera “super computadora” programable del mundo: MANIAC (por sus siglas en inglés, Mathematical Analyzer, Numerical Integrator and Computer). Con el fin de resolver problemas de difusión aleatoria de neutrones en materiales fisibles, científicos como Stanislaw Ulam, John von Neumann, Nicholas Metropolis y Enrico Fermi, desarrollaron un método basado en muestreos

estadísticos que fue utilizado en el diseño de la bomba atómica. La idea original del método fue concebida por Ulam y desarrollada por él y von Neumann. Metropolis jugó un papel fundamental en la popularización del método (Metropolis y Ulam, 1949) y fue él quien propuso el nombre “Monte Carlo”, en honor a la ciudad del principado de Mónaco famosa por sus casas de juego.

III.1 Breve descripción del método

El método de Monte Carlo permite resolver problemas matemáticos mediante la simulación de experimentos que involucran variables aleatorias.

El método se basa normalmente en un algoritmo con una estructura sencilla. Como regla general, se elabora primero un programa para la realización de una prueba aleatoria. Después, éste se repite N veces de modo que cada experimento sea independiente de los anteriores y, finalmente, se toma la media de los resultados de todos los experimentos. Por esto el método de Monte Carlo se denomina a veces *método de pruebas estadísticas*.

El error en la cantidad estimada es proporcional a la magnitud $\sqrt{D/N}$, donde D es una constante y N es el número de pruebas (ver sección III.3). Nótese que para disminuir el error por un factor de 10 (en otras palabras, para mejorar la estimación en otra cifra decimal) es preciso aumentar N por un factor de 100.

Dado que al aumentar el número de pruebas se incrementa el tiempo de cómputo, es clara la dificultad de alcanzar por este camino una exactitud elevada. Por eso el método de Monte Carlo resulta especialmente eficaz en la solución de problemas en los cuales no es necesario conocer el resultado con gran exactitud (por ejemplo, cuando es suficiente conocerlo con una incertidumbre del 5 por ciento).

El método de Monte Carlo permite simular cualquier proceso cuyo resultado depende de factores aleatorios. Sin embargo, muchos problemas matemáticos que no tienen la menor relación con cuestiones aleatorias pueden ser modelados en términos de un modelo probabilístico artificial (e incluso más de un modelo) que permita resolverlos. Por consiguiente, el método Monte Carlo puede ser considerado un método universal para la solución de problemas matemáticos.

III.1.1 Descripción del programa MCML

Nuestra simulación de Monte Carlo está basada en un programa que está disponible en internet llamado Monte Carlo Multi-Layered (MCML, por sus siglas en inglés). El programa fue desarrollado por Wang y Jacques (Wang y Jacques, 1993; Wang *et al.*, 1995). Con él se determina el comportamiento de rayos o fotones (tratados como partículas clásicas) que inciden perpendicularmente sobre un medio estratificado. Los procesos y resultados posibles para incidencia normal sobre una capa plano-paralela se ilustran esquemáticamente en la Figura 5. El fotón puede ser reflejado, transmitido o absorbido en la capa. Las cantidades de interés pueden ser la reflectancia, la transmitancia, sus distribuciones angulares, la absorción, su distribución en profundidad, etc.

En lugar de considerar realizaciones de un medio aleatorio con las propiedades estadísticas deseadas, sobre las que se tendrían que realizar promedios, el método considera medios ficticios con ciertas propiedades promedio y leyes de probabilidad que determinan el curso del rayo. El programa sigue la trayectoria de los rayos o “fotones” lanzados sobre el medio, haciendo superposiciones con base en la intensidad. Es decir, que no se toma en cuenta la posibilidad de interferencia entre haces de luz que siguen trayectorias distintas. La idea es que, después de promediar sobre las posi-

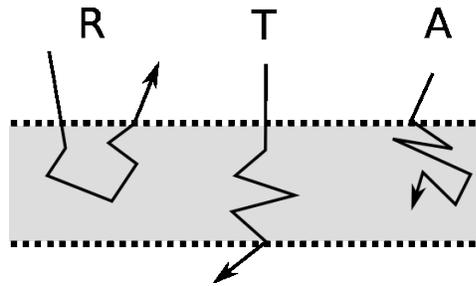


Figura 5. Esquema del recorrido de un fotón dentro del medio. Existen tres posibilidades para el fotón al cruzar el medio, que sea reflejado (R), transmitido (T), o totalmente absorbido (A).

ciones aleatorias de las partículas o heterogeneidades, sobre las diferentes formas de éstas y, en algunos casos, sobre distintas longitudes de onda, los efectos de interferencia desaparecen.

El medio estratificado puede estar compuesto por varias capas de medios no homogéneos. Las capas se suponen infinitas en el plano (x, y) y se caracterizan por los siguientes parámetros: su espesor Δz , el índice de refracción n del medio en el que están las inhomogeneidades (matriz), los coeficientes de absorción (μ_a) y esparcimiento (μ_s), y el factor de anisotropía g (ver capítulo II). Como ya hemos mencionado, el coeficiente de absorción μ_a está definido como la probabilidad de que el fotón sea absorbido por unidad de longitud y, similarmente, el coeficiente de esparcimiento μ_s se define como la probabilidad de que el fotón sea esparcido por unidad de longitud. Usaremos también el coeficiente de interacción total μ_t , el cual se define como la suma de los coeficientes de absorción y de esparcimiento. El factor de anisotropía está definido como el promedio del coseno del ángulo de esparcimiento. Cuando $g = 0$, el patrón de esparcimiento es isotrópico, cuando $g = 1$, toda la luz esparcida sale en la dirección de incidencia y

cuando $g = -1$, toda la luz esparcida está en la dirección de retroesparcimiento. El índice de refracción del medio de incidencia (e.g. aire) y el índice de refracción del sustrato (si existe) también tienen que ser dados. Aunque en el cálculo no es posible tener capas de extensión infinita, éstas pueden ser consideradas como tales si sus dimensiones son mucho mayores que el camino libre medio de la luz en el medio, $l = 1/\mu_s$.

El programa calcula las siguientes cantidades físicas: absorción, reflectancia y transmitancia. La simulación propaga haces de fotones en un espacio tridimensional, calcula las pérdidas en el “peso” del haz debidas a absorción y las guarda en la celda correspondiente de un arreglo tridimensional $A(x, y, z)[J/cm^3]$. Posteriormente, puede calcular el flujo $\Phi(x, y, z) [J/cm^2]$ dividiendo la absorción por el coeficiente de absorción μ_a . Ya que la absorción y el flujo pueden ser determinados el uno del otro, el programa calcula solamente la absorción. La simulación también graba la fuga de los fotones por las superficies superior e inferior como reflectancia y transmitancia [$cm^3 sr^{-1}$], así como sus distribuciones originales.

III.1.2 Sistemas coordenados y normalización de variables

El programa MCML utiliza tres sistemas de coordenadas. Para propagar al paquete de fotones se usa un sistema de coordenadas cartesiano. El origen del sistema cartesiano es el punto de entrada del fotón al sistema, y la superficie del medio de entrada define el plano xy . Debido a que el sistema es estadísticamente invariante ante rotaciones alrededor del eje que define la entrada del fotón al medio, se pueden estimar promedios radiales integrando las distintas cantidades sobre el ángulo azimutal ϕ . Por esta razón, es conveniente utilizar un sistema de coordenadas cilíndricas para grabar la distribución de la absorción de los fotones que interactúan con el medio. Es decir, se graba $A(r, z)$,

donde $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ es la coordenada radial en el plano xy y z define la profundidad. También se usa este sistema de coordenadas cilíndrico para guardar las distribuciones angulares de la reflectancia difusa y la transmitancia total. Estas corresponden a las distribuciones en $z = 0$ y $z = z_{max}$, y son grabadas en los arreglos $R_d(r, \alpha)$ y $T_t(r, \alpha)$, respectivamente, donde α es el ángulo entre la dirección de salida del fotón y la normal (eje $-z$ para reflectancia y z para transmitancia) a la superficie del medio. Los sistemas coordenados cartesiano y cilíndrico comparten el origen y el eje z . Para calcular los cambios en la dirección de propagación del paquete de fotones se usa un sistema coordenado esférico en movimiento, en el cual el eje z se alinea dinámicamente con la dirección de propagación del fotón. En este sistema coordenado esférico, el ángulo de deflexión θ y el ángulo azimutal ϕ cambian de valor en cada interacción y la dirección de propagación se actualiza en términos de los cosenos directores en el sistema coordenado cartesiano.

Como ya lo mencionamos, al utilizar las coordenadas cilíndricas para guardar los valores calculados de absorción $A(r, z)$, reflectancia $R_d(r, \alpha)$ y transmitancia $T_t(r, \alpha)$, el programa MCML parte de la suposición que existe una simetría azimutal. Al estimar la absorción sobre anillos integrando sobre el ángulo ϕ , se reduce el error estadístico del cálculo ($\sim 1/\sqrt{N}$) y, consecuentemente, el tiempo de cómputo requerido.

Hasta este momento, los arreglos $R_d(r, \alpha)$ y $T_t(r, \alpha)$ representan el número de fotones emitidos por un anillo superficial de radio $r + dr$ en la dirección $\alpha + d\alpha$. El área del anillo es

$$da = 2\pi r dr, \quad (25)$$

y el ángulo sólido que subtiende la malla angular alrededor del anillo es

$$d\Omega = 4\pi \sin \alpha \sin(da/2). \quad (26)$$

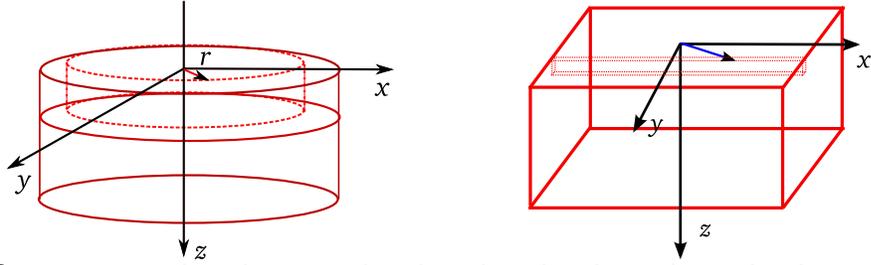


Figura 6. Sistemas coordenados considerados al grabar los valores de absorción. Al lado izquierdo tenemos el sistema coordenado cilíndrico que usa el programa MCML original. Al lado derecho el sistema coordenado cartesiano usado por nosotros.

Para convertir $R_d(r, \alpha)$ en reflectancia por unidad de área perpendicular a la dirección de observación por ángulo sólido, es necesario dividirla por el área proyectada por el anillo en la dirección α , por el ángulo sólido y por el número de fotones lanzados (N). Es decir que

$$\begin{aligned}
 R_d(r, \alpha) &\leftarrow R_d(r, \alpha)/da \cos \alpha d\Omega N \quad [\text{cm}^{-2}\text{sr}^{-1}], \\
 T_t(r, \alpha) &\leftarrow T_t(r, \alpha)/da \cos \alpha d\Omega N \quad [\text{cm}^{-2}\text{sr}^{-1}].
 \end{aligned} \tag{27}$$

Una descripción más detallada de la normalización de las variables obtenidas con el programa MCML se encuentra en el manual del programa y en la tesis de maestría de E. Terán (2005) (Cap. II, secciones 3.1 y 3.2).

El sistema estratificado considerado es invariante ante traslaciones en el plano xy , de manera que es irrelevante el punto en el que incide el fotón. En vez de iluminar sobre varios puntos es conveniente colapsar todos los puntos de incidencia en el origen. Sin embargo, para hacer cálculos con otras geometrías, como nuestro modelo de coral, es necesario replantear estas suposiciones, lo cual haremos más adelante.

III.1.3 Generación de variables aleatorias

Para realizar simulaciones tipo Monte Carlo, es necesario generar en una computadora variables aleatorias que sigan una función de densidad de probabilidad $P_X(x)$ definida.

Estas variables aleatorias son frecuentemente llamadas *números aleatorios* por simplicidad. Sin embargo, es difícil guardar auténticos números aleatorios de manera controlada y su uso podría no ser deseable. Por ejemplo, al depurar un programa, usualmente tenemos que reproducir los resultados más de una vez. Una alternativa que es normalmente aceptada es el uso de *números pseudo-aleatorios*.

De inicio, es necesario generar variables aleatorias *uniformemente* distribuidas en $[0, 1]$. Utilizamos entonces un *generador de números pseudo-aleatorios* constituido por un algoritmo que empieza con un valor inicial u_0 (i.e., la *semilla*) y que produce una secuencia de valores en $[0, 1]$ con las propiedades requeridas. Se han reportado varias rutinas para la generación de números pseudo-aleatorios (ver por ejemplo, Marsaglia y Zaman (1993) y Knuth (1997)). Por facilidad en la implementación, hemos adoptado la rutina descrita en el libro de las recetas numéricas en C (Press *et al.*, 1986).

Sin embargo, las leyes de propagación de los rayos (o “fotones”) están descritas por variables aleatorias que no siguen una distribución uniforme. Es entonces necesario generar variables aleatorias con otro tipo de estadísticas. Para esto empleamos el método de la transformación inversa y el método del rechazo.

El método de la transformación inversa

El método de la transformación inversa permite la generación de números aleatorios con una función de densidad de probabilidad (FDP) dada, a partir de otros números con una FDP conocida. El método requiere que la FDP dada sea integrable y que su integral sea invertible, lo cual limita su aplicabilidad. Sin embargo, tiene la ventaja de estar basado en expresiones analíticas. Dada la facilidad de encontrar rutinas computacionales para la generación de números aleatorios o pseudo-aleatorios con una distribución uniforme en el intervalo $[0, 1]$, normalmente es conveniente partir de ella.

Sea U una variable aleatoria distribuida uniformemente en el intervalo $[0, 1]$ y $P_U(u)$ su función de densidad de probabilidad. Consideremos ahora una nueva variable aleatoria z , definida a través de

$$z = f(u), \quad (28)$$

donde $f(u)$ es una función que suponemos es monótonica (ver figura 7). La relación entre u y z es entonces invertible; $u = f^{-1}(z)$.

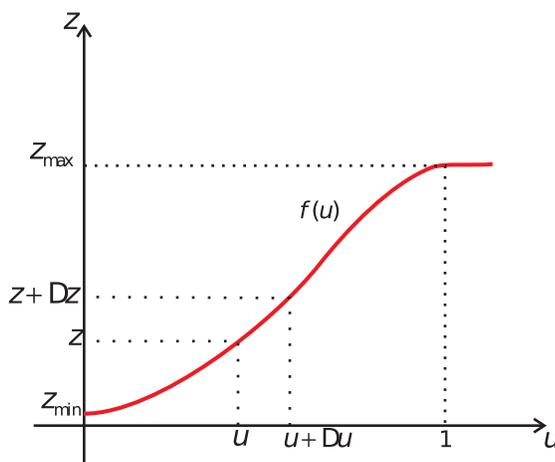


Figura 7. Función monótonica

De la figura 7 podemos ver que la probabilidad de que la variable aleatoria U esté entre u y $u + \Delta u$ es igual a la probabilidad de que la variable aleatoria Z esté entre z y $z + \Delta z$. Es decir que

$$P_Z(z)\Delta z = P_U(u)\Delta u. \quad (29)$$

Ahora, dado que

$$P_U(u) = \begin{cases} 1 & 0 \leq u \leq 1, \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (30)$$

se tiene que

$$P_Z(z)\Delta z = \Delta u \quad (31)$$

para $0 \leq u \leq 1$ y $z_{min} \leq z \leq z_{max}$, donde z_{min} y z_{max} están dadas por $f(0)$ y $f(1)$ (o viceversa si se trata de una función decreciente).

Entonces tenemos que,

$$\int_0^u \Delta u = \int_{z_{min}}^{z=f(u)} P_Z(z) \Delta z, \quad (32)$$

que resulta en la relación

$$u = F_Z(z), \quad (33)$$

donde $F_Z(z)$ es la función de distribución asociada a la variable aleatoria Z . Es claro entonces que la función que buscamos está dada por la integral definida de $P_Z(z)$. Es decir que $f^{-1}(z) = F_Z(z)$. La transformación que deseamos es entonces

$$f(u) = F_Z^{-1}(u). \quad (34)$$

Resumiendo, para generar números aleatorios con la FDP dada por $P_Z(z)$, debemos encontrar primero la función de distribución

$$F_Z(z) = \int_{-\infty}^z P_Z(x) dx. \quad (35)$$

La función que necesitamos para transformar u está dada por la inversa de esta función.

Para ilustrar el método, presentaremos primero el cálculo de la transformación requerida para generar los desplazamientos aleatorios de una partícula (o paquete de fotones) en un medio no homogéneo. Después presentaremos la transformación requerida para generar los cambios en la dirección de la partícula en cada interacción.

Generación de números aleatorios para los desplazamientos

Deseamos generar números que sigan la FDP

$$P_S(s) = \mu_t \exp(-\mu_t s), \quad (36)$$

para $s \geq 0$ ($P_S(s) = 0$ para $s < 0$). Calculamos entonces

$$F_S(s) = \int_{-\infty}^s P_S(x) dx = 1 - \exp(-\mu_t s) = u. \quad (37)$$

Despejando de la relación anterior, obtenemos

$$s = F_S^{-1}(u) = -\frac{\ln(1-u)}{\mu_t}. \quad (38)$$

Observamos que, como lo requiere el método, la función es monotónica. Notamos también que si u es aleatorio entre 0 y 1, $(1-u)$ también lo es. Entonces, si r es una variable aleatoria uniformemente distribuida en el intervalo $[0, 1]$, la variable aleatoria

$$s = -\frac{\ln r}{\mu_t}, \quad (39)$$

sigue la FDP dada por la ecuación (36).

Generación de números aleatorios para las direcciones

El programa MCML utiliza el método de la transformación para generar los números aleatorios que determinan las nuevas direcciones que tomará el paquete de fotones en cada interacción. La FDP empleada para este fin es la de función de fase de Henyey-Greenstein, que se puede escribir de la siguiente manera

$$p(x = \cos \theta, g) = \frac{1}{2} \frac{(1-g^2)}{(1+g^2-2gx)^{\frac{3}{2}}} \quad (40)$$

donde

$$g = \langle x \rangle = \langle \cos \theta \rangle = \int_{-1}^1 xp(x) dx. \quad (41)$$

Ahora usaremos el método de la transformación para encontrar la función que nos permita generar los números aleatorios regidos por esta FDP. Partiendo de la ecuación (33) podemos escribir

$$u = F(x) = \int_0^x \left[\frac{1}{2} \frac{(1-g^2)}{(1+g^2-2g\gamma)^{\frac{3}{2}}} \right] d\gamma. \quad (42)$$

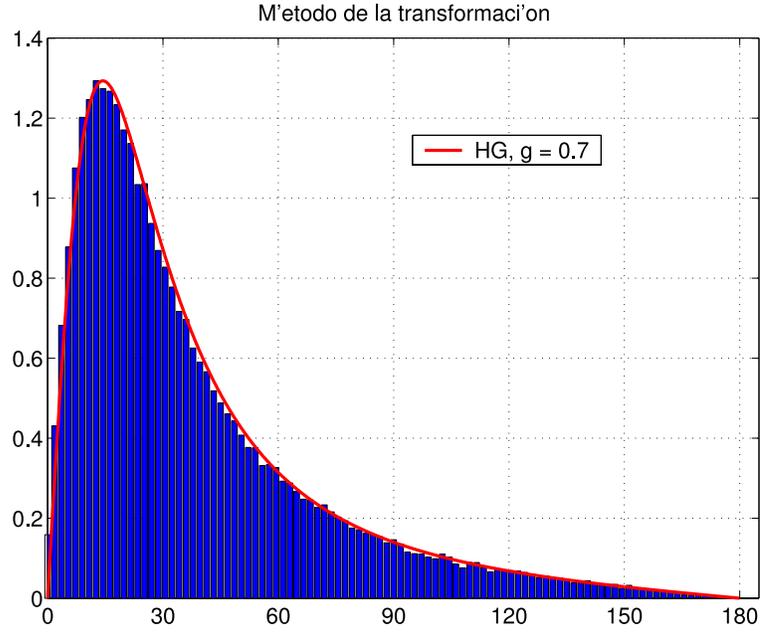


Figura 8. Método de la transformación. La curva nos muestra la función de fase de Henyey-Greenstein para $g = 0.7$. También se muestra el histograma de los números aleatorios generados por el método de la transformación, para una FDP de HG con $g = 0.7$.

Evaluando la integral, tenemos que

$$u = \frac{(1 - g^2)}{2g} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + g^2 - 2gx}} - \frac{1}{1 - g} \right] \quad (43)$$

y, despejando la variable x , tenemos finalmente que

$$x = \frac{1}{2g} \left[1 + g^2 - \frac{(1 - g^2)^2}{(1 + g^2 - 2gu)^2} \right]. \quad (44)$$

A través de esta expresión podemos generar números aleatorios con la FDP de Henyey-Greenstein. Empezando con una variable U distribuida uniformemente en el intervalo $[0, 1]$ la variable x sigue la distribución de Henyey-Greenstein (ver figura 8). Una de las ventajas de esta función de fase es que depende sólo de la variable g .

El método del rechazo

El método descrito en la sección anterior es útil para generar números aleatorios que siguen una función de densidad de probabilidad particular, a través de la transformación de una variable aleatoria uniforme. Sin embargo, el método puede ser computacionalmente complicado si no se tiene una función motónica, pues la transformación se debe aplicar por secciones. Esto nos lleva a considerar un método más general llamado el método del rechazo. El término es adecuado porque no todas las muestras generadas son usadas; algunas son rechazadas. Esta desventaja es compensada por el hecho de que el procedimiento es relativamente simple. Procederemos ahora a describir el método siguiendo el desarrollo dado por Spanier (Spanier y Gelbard, 1981).

Sea $f(x)$ una función de densidad de probabilidad que se hace cero fuera de un cierto intervalo (a, b) . Deseamos generar muestras aleatorias que obedecen esta FDP. Sea $M = \sup_{a \leq x \leq b} f(x)$, el valor máximo que adquiere $f(x)$ en el intervalo $[a, b]$ y definamos

$$f_1(x) = f(x)/M. \quad (45)$$

Vemos que $0 \leq f_1(x) \leq 1$ para $a \leq x \leq b$. Generamos un par (ρ_1, ρ_2) de números aleatorios uniformes en $[0, 1]$ e interpretemos $(a + \rho_1(b - a), \rho_2)$ como un punto en el rectángulo con base $(b - a)$ y altura 1 (ver figura 9). Si este punto cae debajo de la curva de $f_1(x)$, *i.e.* si $\rho_2 < f_1(a + \rho_1(b - a))$, el número aleatorio $t = a + \rho_1(b - a)$ es aceptado como una muestra de la variable aleatoria. Si no, el número es rechazado y el proceso se repite hasta que se genera un valor aceptable.

La densidad conjunta de t y ρ_2 , $g(t, \rho_2)$, está dada por

$$g(t, \rho_2) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{si } a \leq t \leq b, \quad 0 \leq \rho_2 \leq 1 \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (46)$$

ya que t y ρ_2 son independientes y uniformes. Entonces, la densidad condicional de t dado que $\rho_2 < f_1(t)$ se puede escribir como

$$\begin{aligned}
 g_1(t|\rho_2 < f_1(t)) &= \frac{\left(\frac{1}{b-a}\right) \int_0^{f_1(t)} d\rho_2}{\left(\frac{1}{b-a}\right) \int_a^b dt \int_0^{f_1(t)} d\rho_2} \\
 &= \frac{f_1(t)}{\int_a^b f_1(t) dt} \\
 &= f(t).
 \end{aligned} \tag{47}$$

Entonces las muestras de t generadas de esta manera siguen la densidad correcta.

Como mencionamos antes, la técnica del rechazo tiene la desventaja de que no todos los pares aleatorios (ρ_1, ρ_2) resultan en una muestra que corresponde a la densidad $f(x)$. La eficiencia E de la técnica está determinada por la fracción de pares (ρ_1, ρ_2) que no son rechazados y esto es justamente la razón entre el área bajo la curva $f_1(x)$ y el área del rectángulo que la encierra (ver figura 9). Es decir que,

$$E = \frac{\int_a^b f(x) dx}{M(b-a)} = \frac{1}{M(b-a)}.$$

Dado que el rectángulo $M(b-a)$ encierra a la curva $f(x)$, se tiene que $E < 1$. Entonces, para una comparación computacional entre el método del rechazo y el método de la transformación, habría que comparar el número de operaciones aritméticas y lógicas por muestra que requiere el método de inversión comparado con el producto de $1/E$ y el número de operaciones requeridas para el método del rechazo. El método del rechazo es normalmente más costoso. Un punto extra a señalar es que, para usar el método del rechazo, es necesario encontrar $M = \sup_{a \leq x \leq b} f(x)$, o al menos una curva que cubra a $f(x)$.

Una tercera técnica de muestreo es el método de Metropolis (también conocido como *Markov chain Monte Carlo*). Esta técnica puede utilizarse para generar números

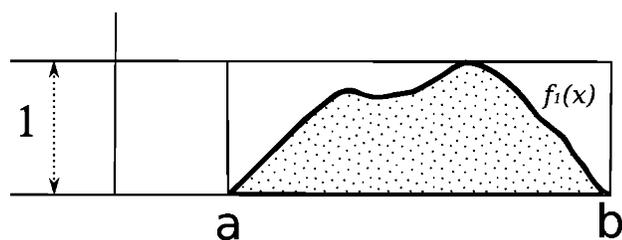


Figura 9. Esquema del método del rechazo.

aleatorios con una densidad de muestreo arbitraria en un espacio de varias dimensiones y tiene la ventaja de que la función de densidad no necesita estar normalizada por el máximo. La desventaja principal del método de Metropolis es que las muestras que generan no son independientes y, de hecho, están fuertemente correlacionadas.

III.2 Simulación de Monte Carlo para medios no planos

En esta sección se describen las modificaciones hechas al programa MCML para realizar cálculos con geometrías más generales. Para estudiar el modelo de coral propuesto (ver capítulo VII), debemos relajar la invariancia del sistema en el plano xy , permitiendo que las capas puedan tener variaciones de altura en una dirección. Suponemos entonces que el medio tiene una variación periódica a lo largo del eje x y que es invariante a lo largo del eje y (ver figuras 10 33).

Estas adecuaciones modifican la manera en que se obtienen los promedios. Por otro lado, al perder la invariancia en el plano xy , debemos también modificar el algoritmo que determina si el fotón cruza una frontera. Aunque esto último suena sencillo, tiene

sus complicaciones. A continuación se describen todos estos cambios.

III.2.1 Sistemas periódicos bidimensionales

Como ya hemos mencionado el programa MCML considera para sus cálculos medios estratificados planos. Para iluminación invariante en xy el problema se reduce a calcular variables cuyo promedio es solamente función de la variable z . Esto reduce las fluctuaciones estadísticas en la estimación del promedio. Como veremos más adelante, al permitir variaciones a lo largo del eje x las fluctuaciones estadísticas son mayores que en el caso en que se tiene invariancia para el mismo número de fotones. Si consideramos variaciones a lo largo del eje x y y las fluctuaciones serían aún mayores. La geometría del modelo considerado nos lleva a escoger un sistema coordenado cartesiano en el que grabamos los valores de absorción, reflectancia difusa y transmitancia total, en lugar del sistema coordenado cilíndrico empleado por el programa MCML. Este cambio de coordenadas también tiene consecuencias en la normalización de las variables calculadas. Para calcular el diferencial de ángulo sólido ($d\Omega$) y el diferencial de área (da) [ecuaciones (26) y (25)], se requieren los siguientes cambios

$$\begin{array}{ll} \text{Coordenadas cilíndricas} & \text{Coordenadas cartesianas} \\ d\Omega = 4\pi \sin \alpha \sin(d\alpha) & \rightarrow d\Omega = d\alpha \\ da = 2\pi r dr & \rightarrow da = dx dy, \end{array}$$

donde $d\alpha$ denota el diferencial de ángulo que forma el fotón al salir del medio con respecto a la perpendicular a la superficie y $dr = \sqrt{dx^2 + dy^2}$, siendo dx y dy los diferenciales a lo largo de los ejes x e y , .

Una consecuencia importante de perder la invariancia a lo largo del eje x es que ya no podemos hacer incidir los fotones en el punto $(x, y) = (0, 0)$. Sin embargo, como



Figura 10. Ejemplo de una sección de esqueleto de coral con una geometría similar a la del modelo propuesto.

conservamos todavía la invariancia en y , podemos considerar que la incidencia se da a lo largo de la línea $y = 0$. Por otro lado, para evitar efectos de borde, ya sea en la iluminación o en el dominio computacional, hemos supuesto que el medio es periódico (periodo L_y) y que se ilumina un periodo de manera uniforme. Para algunas especies de coral (como la mostrada en la figura 10) esta suposición puede ser realista, pues los septos tienen solo pequeñas variaciones en una dirección y , en la otra, la estructura se repite, aunque con algunas variaciones, a intervalos más o menos regulares.

pueden considerarse periódicos.

La implementación de las condiciones de frontera periódicas se puede explicar con referencia a la figura 11. Si en algún momento un fotón se sale del dominio por la frontera en $x = L_x/2$, es desplazada automáticamente una distancia $-L_x$ a la misma altura (ver figura 11). De manera similar, pero desplazándolo una distancia $+L_x$ se trata a un fotón que sale por la frontera $x = -L_x/2$.

Después de cada interacción del fotón con el medio, y una vez que se ha escogido la dirección, es necesario saber si en su siguiente desplazamiento cambiará de medio. Para determinar esto se compara la distancia a la interfase (d_{lb}) con la magnitud del desplazamiento s . Si s es mayor que d_{lb} el fotón cruzará la interfase, si es menor permanecerá en el mismo medio. El algoritmo que determina esto en el programa

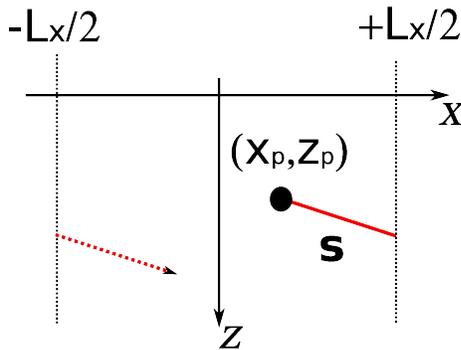


Figura 11. Esquema del algoritmo usado para la periodicidad del programa MCML*. El ancho del medio está definido por L_x .

original es muy sencillo debido a que sólo consideramos interfaces planas.

En un medio con variaciones de altura en las interfaces el algoritmo que determina si el fotón o rayo cambia de medio es un poco más complicado. El algoritmo que implementamos en la simulación para hacer esto calcula el punto de intersección entre la interfase y el rayo. Con este punto de intersección estimamos la distancia a la interfase y después comparamos este valor con la magnitud del desplazamiento s . Si la distancia a la interfase es mayor que s cambiará de medio. Si no, permanecerá en él.

Entonces para cada interacción se conoce la posición (x, y, z) del fónon y se sabe en que capa se encuentra. Con esta información se va guardando una fracción del paquete de fotones en la variable que define la absorción en cada punto del medio, $A(x, z)$ y, simultáneamente, se guarda esa misma cantidad en la variable que define la absorción de la capa, $A_{\text{capa}}(\text{capa})$.

Debido a que cada una de las capas del medio puede tener índices de refracción diferentes debemos tomar en cuenta las reflexiones internas ocasionadas por el contraste de índices y el efecto de tener variaciones de altura. El programa MCML estima las reflexiones de Fresnel considerando que las interfaces son localmente planas.

Cabe señalar que para hacer una modificación exitosa en el programa MCML se debe conocer con profundidad su mecanismo de operación, ya que las rutinas de todos los archivos están interrelacionadas.

La versión original del programa MCML está compuesta por 5 archivos: *mcml-main.c*, *mcmlgo.c*, *mcmlio.c*, *mcmlnr.c* y *mcml.h*. El programa está escrito en el lenguaje de programación Ansi C y cuenta con alrededor de 2,500 líneas de código en total. El archivo *mcmlmain.c* contiene las funciones principales del programa, las cuales controlan las rutinas definidas en los archivos restantes. En el archivo *mcmlgo.c* están las funciones que determinan la trayectoria del fotón dentro del medio. El archivo *mcmlio.c* guarda las rutinas que leen los parámetros de entrada y escriben los resultados obtenidos. El archivo *mcmlnr.c* contiene rutinas para asignar memoria dinámica a las variables. Finalmente en el archivo *mcml.h* se definen las estructuras que contiene las propiedades del fotón, el medio y las variables de salida.

El programa modificado (MCML*) está compuesto por los 5 archivos anteriores (versiones modificadas) y 2 más: *rand.h* y *cross.h*. El archivo *rand.h* contiene nuevos algoritmos para generar números aleatorios y rutinas requeridas al considerar los cambios de altura en las interfases. El archivo *cross.h* está compuesto enteramente por algoritmos que se encargan de determinar cuando un fotón cruza una interfase. En este archivo se pueden encontrar diferentes versiones de este algoritmo. Estas subrutinas también están escritos en Ansi C. Cabe decir que a lo largo de su desarrollo se han escrito más del doble de líneas de código que los 5 archivos del programa original. Esta versión modificada del programa MCML hace cálculos más complejos que la versión original, por lo que el tiempo de cómputo es alrededor del doble.

El programa original define los parámetros del medio en un archivo de entrada con extensión “*.mci”. En este archivo se encuentran el número de corridas del programa,

el nombre del archivo de salida, el tamaño de las celdas, en r y z , el número total de celdas en cada eje y las propiedades ópticas de cada capa, incluyendo los medios de entrada (superior) y de salida (inferior).

El programa modificado además de contar con todos los parámetros anteriores incluye el ancho de iluminación del medio (L_x), el ángulo de incidencia de cada rayo (directo o difuso) y los parámetros que definen las interfases del medio.

La figura 12 ilustra el diagrama de flujo de la simulación de Monte Carlo.

III.3 Error estadístico del método

Al modificar el programa MCML se hizo la suposición de que el sistema era invariante a lo largo del eje y , y se dijo que esto nos permitía reducir el tiempo de cómputo. En esta sección justificaremos esta aseveración.

Suponemos que tenemos M celdas en las que vamos a capturar fotones de forma aleatoria, pero por el momento consideramos solamente una de ellas. Lanzamos ahora un fotón. El fotón cae en la celda con una probabilidad p y no cae en la celda con probabilidad $(1 - p)$ (experimento de Bernoulli). Suponemos que la probabilidad p es fija, pero no tiene que ser conocida.

Después de tirar N fotones, la probabilidad de tener n de ellos en la celda sigue la ley de Bernoulli (Friden, 1983).

$$P_N(n) = \binom{N}{n} p^n (1 - p)^{N-n}, \quad (48)$$

donde $\binom{N}{n}$ es el coeficiente binomial. Los primeros momentos de esta distribución

son (Friden, p. 138)

$$\langle n \rangle = Np, \quad (49)$$

$$\sigma_n^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = Np(1-p). \quad (50)$$

aquí $\langle \rangle$ representa un promedio sobre varias realizaciones del experimento. Es decir, es el resultado de promediar sobre experimentos en los que lanzamos N fotones.

El número $\bar{p} = n/N$ representa la estimación del promedio p con esta muestra estadística de N fotones. Dado que

$$\langle \bar{p} \rangle = \frac{\langle n \rangle}{N} = \frac{Np}{N} = p, \quad (51)$$

se dice que el estimador \bar{p} no es sesgado.

Si hacemos el experimento de lanzar N fotones varias veces, en cada uno se tendrá un valor distinto de n y, por lo tanto, un valor distinto de \bar{p} .

Nos preguntamos entonces qué tanto error en promedio habrá en la estimación de p . El error cuadrático medio está dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \sqrt{\langle (p - \bar{p})^2 \rangle} \\ &= \frac{1}{N} \sqrt{\langle (Np - n)^2 \rangle} \\ &= \frac{\sigma_n}{N}, \end{aligned} \quad (52)$$

donde $\sigma_n = \sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}$. Utilizando la ecuación (50) encontramos que el error relativo está dado por

$$\Delta_e = \frac{\mathcal{E}}{p} = \sqrt{\frac{1-p}{Np}}. \quad (53)$$

Consideramos, por simplicidad, el caso en el que el fotón cae en todas las celdas con igual probabilidad. En este caso

$$p = \frac{1}{M}. \quad (54)$$

El número de celdas está dado por

$$M = \frac{V}{\Delta V} = \frac{L_x L_y L_z}{\Delta_x \Delta_y \Delta_z} = M_x M_y M_z, \quad (55)$$

donde V es el volumen del dominio computacional y ΔV es el volumen de una celda.

Si $M \gg 1$ entonces $p \ll 1$ y

$$\Delta_e \simeq \frac{1}{\sqrt{N}\sqrt{p}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{M_x M_y M_z} = \sqrt{\frac{M_x M_y M_z}{N}}. \quad (56)$$

Debido a que el error relativo (Δ_e) está determinado por la razón entre $\sqrt{M_x M_y M_z}$ y \sqrt{N} , es importante lanzar un número grande de fotonones N y tener un valor de $M = M_x M_y M_z$ lo más pequeño posible. Esto muestra la conveniencia de reducir la dimensionalidad del sistema a considerar. Vemos entonces que el programa original considera sistemas invariantes en el plano xy , de manera que para efectos de promedios se tiene un sistema unidimensional. El programa MCML modificado considera sistemas invariantes en y , de manera que se comporta como un sistema bidimensional.

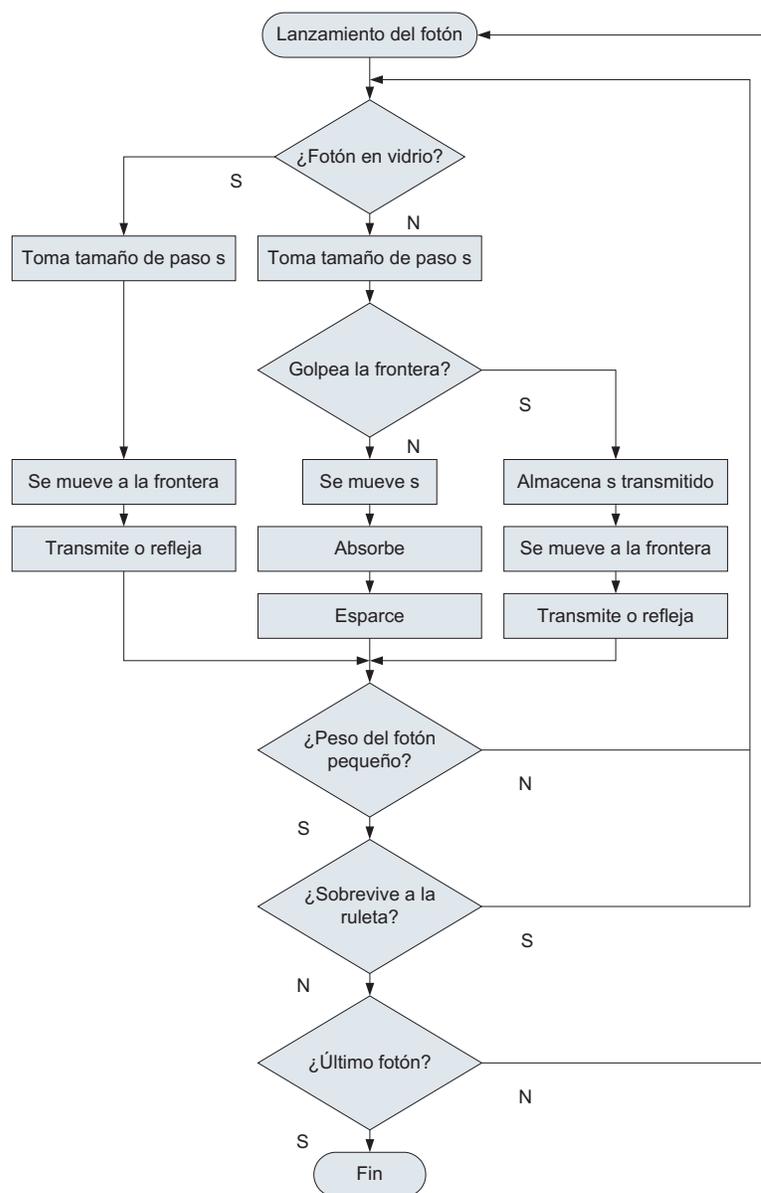


Figura 12. Diagrama de flujo del programa de Monte Carlo.

Capítulo IV

Esferas integradoras

Las propiedades de intercambio de flujo óptico dentro de una cavidad esférica con paredes difusoras ha permitido el desarrollo de dispositivos ópticos para determinar las propiedades de reflectancia (o transmitancia) de medios no homogéneos. Estos dispositivos, conocidos como *esferas integradoras*, son frecuentemente utilizados en diferentes ramas de la ciencia como colectores de luz difusa. Sin embargo, esta interpretación del funcionamiento de una esfera integradora es una sobresimplificación que no es del todo correcta. Por otro lado, el uso de estos dispositivos para medir reflectancias y transmitancias está lleno de sutilezas y fácilmente se puede incurrir en errores importantes en la medición.

El coeficiente de reflexión de una superficie se define como la razón del flujo luminoso que refleja entre el flujo luminoso que incide sobre ella. Cuando se trata de medios homogéneos, los coeficientes de transmisión y reflexión para haces direccionales están dados por el coeficiente de Fresnel. Sin embargo, cuando el medio de transmisión es un medio no homogéneo, la luz reflejada consta en general de dos componentes: una componente difusa y una especular. Más aún, frecuentemente es de interés medir la reflectancia de la muestra bajo iluminación difusa. Estas situaciones se muestran esquemáticamente en la figura 13.

Los coeficientes de reflexión que se obtienen con iluminación direccional y difusa no son iguales y se debe también especificar si se desea considerar la luz reflejada especularmente, la reflejada de manera difusa o ambas. Para caracterizar muestras

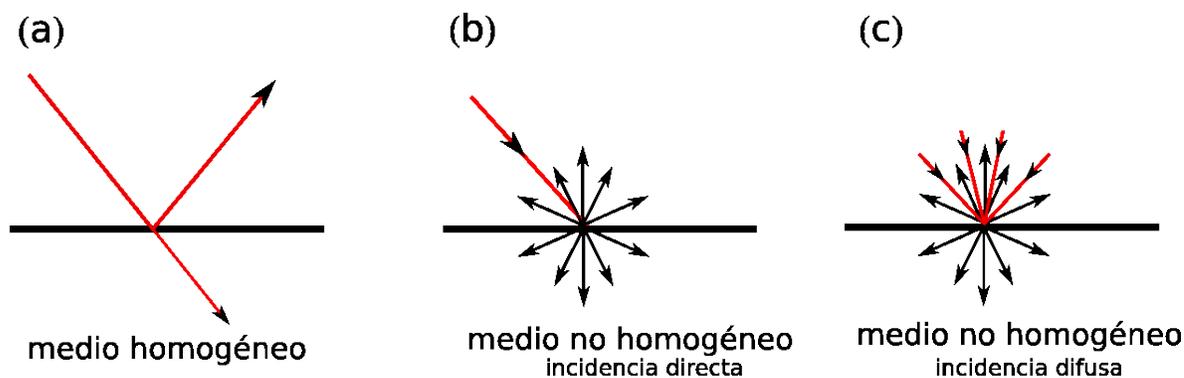


Figura 13. Diferentes tipos de reflexión y transmisión de luz entre dos medios.

que reflejan de manera difusa y estimar la reflectancia es necesario coleccionar toda la luz esparcida, que está distribuida angularmente. Desde de un punto de vista experimental este es un problema complejo.

En este capítulo se presenta un desarrollo de la teoría de las esferas integradoras como dispositivos para determinar la reflectancia y transmitancia de muestras que producen esparcimiento.

IV.1 Reseña histórica

La esfera integradora (o esfera de Ulbricht (1900)) es un dispositivo que nos permite atrapar la luz esparcida por un medio no homogéneo. Está compuesta por una cavidad esférica, cuya pared está recubierta con un material altamente difusor¹. Generalmente cuenta con dos o más aberturas que sirven como puertos de entrada y salida (ver Figura 14).

Uno de los primeros estudios sobre la interacción de la luz con la esfera se debe a

¹Dióxido de Magnesio en las versiones antiguas y, más recientemente, teflón ultra puro (politetrafluoretileno).

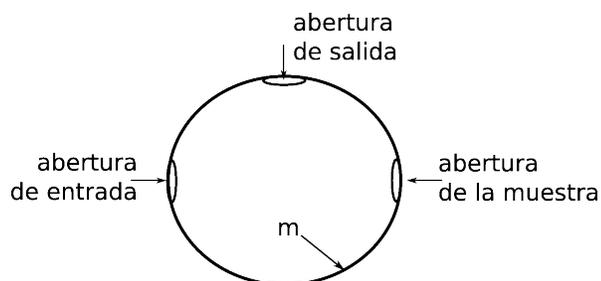


Figura 14. Esquema de una esfera integradora con 3 aberturas. Denotamos la reflectividad de las paredes por m .

Taylor (1920). En un trabajo posterior, Taylor (1935) encontró que la irradiancia (I) en las paredes de la esfera es inversamente proporcional a la absorción de la misma. Es decir que $I \sim (1 - m)^{-1}$, donde m es la reflectividad de las paredes .

En 1955, Jacquez y Kuppenheim reportaron un trabajo en el cual se calcula la irradiancia dentro de una cavidad esférica con 3 aberturas. Hicieron esto a través de la solución de una ecuación integral de Fredholm del primer tipo. Anteriormente, Moon (1940) había resuelto un problema similar pero para una esfera con una sola abertura. De esta manera se llega a una expresión similar a la encontrada por Taylor años atrás, pero involucrando en este caso las aberturas, la reflectividad de las paredes de la esfera y las potencias detectadas. La desventaja principal de esta metodología es que no es fácil hacer modificaciones a la geometría considerada.

Otro método empleado para resolver este problema es el que se conoce como el método de las matrices. Implementado inicialmente por Hisdal (1965) y después desarrollado de forma más clara por Tardy (1991). En este método la ecuación integral de Fredholm es discretizada y separada en n ecuaciones. De esta manera obtenemos un sistema lineal de ecuaciones cuya solución es consistente con la encontrada por Jacquez y Kuppenheim (1955).

Una forma alternativa de estudiar el problema fue presentada por Goebel² en 1967 (Goebel, 1967). El desarrollo se hace a través del ahora llamado método de las reflexiones repetidas, el cual se ha popularizado mucho a raíz de un artículo publicado por Pickering *et al.* (1992). En este método se considera la secuencia de reflexiones dentro de la cavidad y, sumando todas ellas, se obtiene una serie geométrica que resulta en una expresión similar a la obtenida por Jacquez y Kuppenheim (1955). La ventaja de este tratamiento es que es fácil de seguir e ilustra la secuencia de reflexiones que ocurren cuando la luz entra a la cavidad.

Como podemos ver, existen diferentes formas de abordar el problema y, aunque con todos se llega a la misma expresión (Clare, 1998), el desarrollo y el grado de complejidad de cada tratamiento es muy diferente. El método de balance de energía (Taylor, 1920), además de ser el más antiguo, sigue siendo el más directo. Sin embargo, por cuestiones didácticas, en esta tesis usaremos el método de las reflexiones repetidas.

Para estudiar la interacción de la luz con la cavidad de la esfera iniciamos con el estudio del intercambio de flujo radiativo entre dos superficies difusoras.

IV.2 Intercambio de radiación entre superficies difusoras

Supongamos que se ilumina un elemento de una superficie difusora plana con un haz de irradiancia I_o [potencia/área]. La superficie tiene reflectividad m y la distribución

²Aunque Taylor presenta un tratamiento similar en 1935 generalmente se atribuye a Goebel el desarrollo de este método.

angular de la luz reflejada es Lambertiana. La radiancia emitida por este elemento es

$$L_e = mI_o \frac{\cos \theta_e}{\pi} \quad \left[\frac{\text{Watts}}{\text{cm}^2 \text{sterad}} \right], \quad (57)$$

donde θ_e es el ángulo que hace la dirección de emisión con respecto a la normal a la superficie.

Consideremos ahora una segunda superficie difusora dA_r . El flujo (o potencia) que recibe esta superficie es

$$\Phi_r = L_e d\Omega dA_e, \quad (58)$$

donde $d\Omega = dA_r \cos \theta_r / s^2$. Podemos ver que,

$$\begin{aligned} \Phi_r &= L_e d\Omega dA_e \\ &= \left[mI_o \frac{\cos \theta_e}{\pi} \right] \left[dA_r \frac{\cos \theta_r}{s^2} \right] dA_e \\ &= \frac{\cos \theta_e \cos \theta_r}{\pi s^2} dA_r I_e dA_e, \end{aligned} \quad (59)$$

donde $I_e = mI_o$. Entonces,

$$\Phi_r = \frac{\cos \theta_e \cos \theta_r}{\pi s^2} dA_r \Phi_e, \quad (60)$$

en donde hemos puesto $\Phi_e = I_e dA_e$. La expresión (60) representa una relación entre los flujos (potencias) emitidos y recibidos por las superficies.

Sea

$$F_{er} = \frac{\cos \theta_e \cos \theta_r}{\pi s^2} dA_r, \quad (61)$$

entonces

$$\Phi_r = F_{er} \Phi_e. \quad (62)$$

Consideremos ahora el caso de una esfera perfecta, como se ilustra en la figura 15.

Vemos que $\theta_e = \theta_r$ y que

$$\cos \theta_r = \frac{s/2}{r}, \quad (63)$$

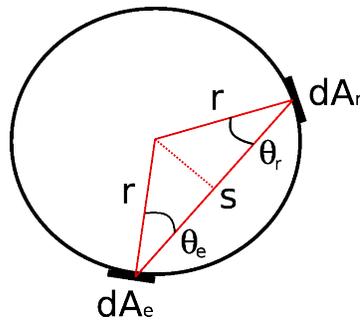


Figura 15. Intercambio del flujo entre dos elementos de área dentro de una cavidad esférica.

Por lo tanto, $s = 2r \cos \theta_r$. Sustituyendo estas cantidades en la ecuación (64) tenemos que dentro de una esfera

$$F_{er} = \frac{dA_r}{4\pi r^2} = \frac{dA_r}{A}, \quad (64)$$

donde A es el área de la esfera. Podemos ver que F_{er} es independiente de la posición de estos dos elementos de la superficie. En otras palabras el flujo que sale de cada elemento de la esfera se reparte de manera uniforme sobre toda la superficie de la esfera. La relación es entonces válida para áreas finitas, no solamente áreas diferenciales.

Entonces el flujo que recibe un elemento es proporcional a su área y al flujo emitido,

$$\Phi_r = \frac{A_r}{A} \Phi_e. \quad (65)$$

La ecuación (65) representa una propiedad muy importante de la esfera integradora.

IV.3 Potencia detectadas en términos de las aberturas

En esta sección se derivan expresiones para las potencias detectadas en términos de las aberturas de la esfera y las reflectividades de los diferentes elementos involucrados.

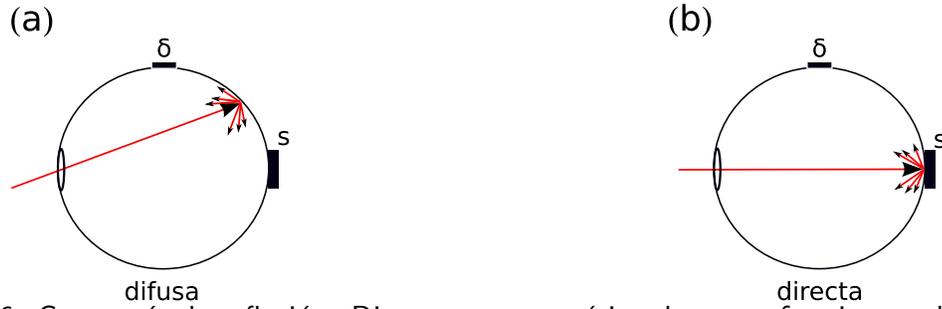


Figura 16. Geometría de reflexión. Diagrama esquemático de una esfera integradora. Incidencia difusa (a) y directa (b) sobre la muestra A_s es el área que ocupa el detector y A_s el área de la muestra.

IV.3.1 Geometría de reflexión

Consideramos una esfera de área total $A = 4\pi r^2$, cuyo interior está recubierto por un material difusor de reflectividad m . La esfera tiene tres aberturas. La abertura donde colocamos la muestra de área A_s , la abertura del detector con área A_δ y la abertura de entrada del haz, con área A_h . Suponemos que la muestra tiene reflectancia difusa R_d y que el detector tiene reflectancia r . La fracción de área de la esfera cubierta por el material difusor (es decir, el área interior de la esfera quitando las aberturas) es

$$\alpha = \frac{A - (A_s + A_\delta + A_h)}{A}.$$

Luz incidente sobre la pared

Siguiendo el desarrollo de Pickering *et al.* (1992), consideremos primero el caso que un haz con potencia P_o incide directamente sobre la pared de la esfera, como se ilustra en la figura 16 (a). El flujo, o potencia reflejada por la pared es,

$$mP_o. \tag{66}$$

Suponiendo que la superficie actúa como un difusor lambertiano el flujo es reflejado uniformemente sobre toda la superficie de la esfera, como vimos en la sección anterior. Entonces, el flujo que llega a un elemento de área dA es proporcional al flujo que

ilumina la esfera (mP_o) y a la fracción de área de la esfera que esta área representa. Por lo tanto, de esta primera reflexión, un detector de área A_δ recibirá un flujo

$$\Phi_1 = \frac{A_\delta}{A} m P_o, \quad (67)$$

donde A es el área total interior de la esfera, incluyendo las aberturas.

El detector refleja una fracción r (el coeficiente de reflexión del detector). Similarmente, de la luz que llega a las paredes se refleja una fracción m , y la muestra refleja una fracción R_d (el coeficiente de reflexión de la muestra, que es normalmente el parámetro de interés). Así el total de la luz reflejada en la segunda reflexión será

$$r \frac{A_\delta}{A} m P_o + m \alpha m P_o + R_d \frac{A_s}{A} m P_o. \quad (68)$$

Definiendo

$$F = r \frac{A_\delta}{A} + m \alpha + R_d \frac{A_s}{A}, \quad (69)$$

podemos reescribir la luz reflejada en la segunda reflexión como

$$F m P_o. \quad (70)$$

Vemos que F representa la fracción de la luz incidente que es reflejada difusamente por todas los componentes reflejantes de la esfera.

La luz asociada a esta segunda reflexión se distribuye uniformemente dentro de la esfera y la fracción que llega al detector es

$$\Phi_2 = \frac{A_\delta}{A} m P_o F. \quad (71)$$

De forma similar, de la siguiente (tercera) reflexión, el detector recibirá un flujo

$$\Phi_3 = \frac{A_\delta}{A} m P_o F F. \quad (72)$$

Es claro entonces que de la n -ésima reflexión, el detector recibirá un flujo

$$\Phi_n = \frac{A_\delta}{A} m P_o F^{n-1}. \quad (73)$$

Sumando estos términos *ad infinitum*, tenemos que el flujo total que recibe el detector es

$$P_d = \frac{A_\delta}{A} m P_o (1 + F + F^2 + \dots + F^{n-1} + \dots) \quad (74)$$

La serie geométrica es convergente si $F < 1$ (que es el caso), de manera que

$$P_d = \frac{A_\delta}{A} \frac{m}{1-F} P_o. \quad (75)$$

Sustituyendo el valor de F en la ecuación anterior tenemos que

$$P_d = \frac{A_\delta}{A} \frac{m}{1 - \left(m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r \frac{A_\delta}{A} \right)} P_o \quad (76)$$

Esta expresión relaciona la potencia que llega al detector con la potencia incidente, los parámetros de la esfera y de la reflectividad de la muestra. De la ecuación anterior es posible encontrar una expresión para la reflectancia R_d del medio,

$$R_d = \frac{A}{A_s} \left[1 - m\alpha - m \frac{P_o}{P_d} \frac{A_\delta}{A} - r \frac{A_\delta}{A} \right]. \quad (77)$$

Uno podría pensar que es posible utilizar esta expresión para medir la reflectancia difusa de la muestra, pero ya veremos que esto no resulta práctico.

Luz incidente sobre la muestra

Consideramos ahora el caso en que tenemos luz colimada con potencia P_1 (por generalidad, suponemos que es distinta a P_o) incidiendo directamente sobre la muestra, como se muestra en la Figura 16 (b). La luz reflejada se puede dividir en dos componentes. Una componente especular o coherente,

$$R_c P_1, \quad (78)$$

y una componente difusa

$$R_{cd}P_1. \quad (79)$$

Aquí R_c representa la fracción de la potencia incidente que se refleja de manera especular o coherente para luz incidente colimada y R_{cd} es la fracción que se refleja de manera difusa o incoherente para luz incidente colimada. La esfera es iluminada uniformemente por este flujo difuso.

Si la reflexión especular [ecuación (78)] ilumina la pared de la esfera (que podría ser el caso si en la figura 16 (b) el haz incidente no fuera perpendicular a la superficie de la muestra), se tendría una componente adicional al flujo, dada por

$$mR_cP_1. \quad (80)$$

Algunas esferas cuentan con una abertura extra para sacar la reflexión especular de la esfera y simplificar la medición. Si se incluye la componente especular, tendríamos dos fuentes de luz difusa, dadas por las ecuaciones (78) y (79). Cada una de ellas se comporta de manera similar a la fuente difusa discutida en la sección anterior [ecuación (66)]. La energía colectada por el detector será la suma de las contribuciones de cada una de las fuentes. Esto es,

$$P_{cd} = \frac{A_\delta}{A} \frac{mR_cP_1}{1 - \left(m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r \frac{A_\delta}{A} \right)} + \frac{A_\delta}{A} \frac{R_{cd}P_1}{1 - \left(m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r \frac{A_\delta}{A} \right)}, \quad (81)$$

o bien

$$P_{cd} = \frac{A_\delta}{A} \frac{mR_c + R_{cd}}{1 - \left(m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r \frac{A_\delta}{A} \right)} P_1. \quad (82)$$

Si no se incluye la componente especular, la ecuación anterior se puede escribir como,

$$P_{cd} = \frac{A_\delta}{A} \frac{R_{cd}}{1 - \left(m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r \frac{A_\delta}{A} \right)} P_1. \quad (83)$$

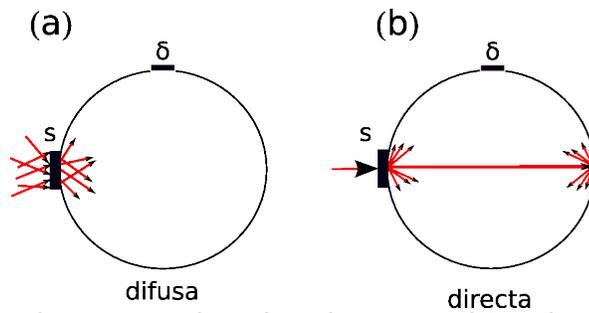


Figura 17. Geometría de transmisión. Arreglo esquemático de una esfera integradora. Incidencia directa (a) y difusa (b). Ver pie de figura de la figura 16

Las expresiones anteriores relacionan la potencia detectada P_{cd} con las reflectancias de la muestra R_d y R_{cd} . Vemos que de estas expresiones no podemos estimar la reflectancia bajo iluminación directa R_{cd} de forma directa. Para esto sería necesario primero estimar R_d pero, como lo veremos más adelante, esta manera de proceder no es la más adecuada.

IV.3.2 Geometría de transmisión

Para medir el coeficiente de transmisión de un medio, la configuración de la esfera cambia. Ahora colocamos la muestra en la abertura de entrada de la esfera, de manera que la muestra puede ser iluminada por fuera con iluminación difusa o directa, como se ilustra en la Figura 17.

Una vez más, consideremos por separado los casos de iluminación difusa y direccional.

Iluminación difusa

En el caso de incidencia difusa sobre la muestra (ver Figura 17 (a)) la fuente secundaria que ilumina a la esfera tiene una potencia

$$T_d P'_o, \quad (84)$$

donde P'_o es la potencia incidente y T_d la transmitancia del medio bajo incidencia difusa. Ponemos un apóstrofo para distinguir las cantidades en la configuración en transmitancia de las de reflectancia.

A través de una procedimiento similar al que utilizamos para medir el flujo o potencia que llega al detector en reflexión, encontramos que para luz incidente difusa,

$$P_t = \frac{A_\delta}{A} \frac{T_d}{1 - \left[m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r \frac{\delta}{A} \right]} P'_o. \quad (85)$$

Vemos que la fórmula resultante es similar a las expresiones (82) y (83) que encontramos para el caso de iluminación con luz direccional en reflexión. Tenemos el mismo problema de no poder estimar el valor de T_d sin conocer el valor de R_d .

Iluminación directa

Cuando la muestra se ilumina de manera direccional, la potencia transmitida que ilumina a la esfera está dada,

$$T_{cd} P'_1, \quad (86)$$

donde T_{cd} es el coeficiente de transmisión (difusa) para luz incidente directa sobre la muestra y P'_1 es la potencia incidente.

Si la luz directa transmitida no sale de la esfera a través de una abertura, entonces hay una segunda fuente de luz difusa determinada por la luz transmitida de manera directa y reflejada por las paredes de la esfera [Figura 17 (b)]. Es decir,

$$m T_c P'_1, \quad (87)$$

donde m es el coeficiente de la reflexión difusa de la pared de la esfera.

Repitiendo el análisis presentado, se encuentra que para iluminación con luz colimada o direccional y una configuración de transmisión, el flujo o potencia que recibe el

detector es

$$P'_{cd} = \frac{A_\delta}{A} \frac{T_{cd} + mT_c}{1 - \left[m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r' \frac{\delta}{A} \right]} P'_1. \quad (88)$$

Para el caso en el que no hay componente coherente o ésta escapa por un orificio de la esfera, la expresión se simplifica un poco pero sigue siendo difícil estimar la transmitancia (T_d o T_{cd}) con este tipo de expresiones.

Cabe señalar que aunque las expresiones para la transmitancia bajo iluminación directa y difusa son muy parecidas, la estimación experimental de ellas involucra arreglos y mediciones con grados de dificultad muy diferentes.

IV.3.3 Incertidumbre en la estimación de la reflectancia

Como hemos visto la teoría de las esferas integradoras nos permite encontrar expresiones que relacionan la reflectancia o la transmitancia de un medio con las potencias detectadas y las aberturas de la esfera. La reflectancia bajo iluminación directa R_{cd} y la transmitancia (directa y difusa) dependen del valor de la reflectancia bajo iluminación difusa R_d . A su vez tenemos una expresión para la reflectancia R_d en función de las aberturas, de un cociente de potencias y de la reflectividad de las paredes. Uno prodría pensar que, si conoce el tamaño de las aberturas y puede medir las potencias, sería posible estimar el valor de las reflectancias y transmitancias. Sin embargo, esto no es tan sencillo. A continuación presentaremos un análisis que ilustra el error que podemos tener en la estimación de la reflectancia R_d al considerar pequeños errores en la estimación de las características de la esfera.

Para estimar la propagación de la incertidumbre de los parámetros que caracterizan a la esfera aplicaremos la teoría descrita por Taylor (1997). Considerando pequeñas variaciones alrededor de la cantidad de interés estimamos el porcentaje de error que

esto produce.

IV.3.4 Teoría de errores

Sea una función $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ de n variables $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$. Cada una de estas variables tiene asociada una incertidumbre $\delta x_1, \delta x_2, \delta x_3, \dots, \delta x_n$. Si las variables x_i son independientes, la incertidumbre de f puede ser escrita como

$$\begin{aligned} \delta f &= \sqrt{\epsilon_{x_1}^2 + \epsilon_{x_2}^2 + \dots + \epsilon_{x_n}^2} \\ &= \sqrt{\sum_j \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \delta x_j \right)^2}. \end{aligned} \quad (89)$$

Es interesante ver el comportamiento de cada uno de los términos de la suma para visualizar la sensibilidad de la medición a errores en los parametros x_i ,

$$\delta f|_{(j)} = \left| \frac{\partial f}{\partial x_j} \right| \delta x_j \quad (90)$$

donde la notación indica que solamente consideramos errores en la variable x_j .

La reflectancia bajo iluminación difusa (R_d) se puede escribir como,

$$R_d = \frac{A}{A_s} \left[1 - m \left(\alpha + \frac{A_s P_o}{A P_d} \right) \right]. \quad (91)$$

Por simplicidad, consideraremos solamente la incertidumbre en la estimación de R_d debido a errores en el valor de m . Esta se puede escribir como,

$$\delta R_d|_{(m)} = \left| \frac{\partial R_d}{\partial m} \delta m \right|. \quad (92)$$

Utilizando la ecuación (91), podemos evaluar facilmente la derivada parcial requerida.

Entonces la derivada parcial de R_d se puede escribir como,

$$\frac{\partial R_d}{\partial m} = \alpha \frac{A}{A_s} + \frac{P_o}{P_d}. \quad (93)$$

Tabla I. 1.0.5 Parámetros típicos de la esfera y una muestra utilizada.

	Área	Reflectividad
esfera	$A = 4\pi(40 \text{ mm})^2$	$m = 0.98$
muestra	$A_s = \pi(4 \text{ mm})^2$	$R_d = 0.4$
hueco	$A_h = A_s$	$R_d = 0$
detector	$A_\delta = \pi(300 \text{ }\mu\text{m})^2$	$r \approx 0$
esfera sin aberturas	$\alpha = 0.995$	
	Potencia	Constantes de la esfera
incidente	$P_o = 1832.6 \text{ mVolts}$	$b_1 = 0.0015586$
detectada	$P_d = 3.2 \text{ mVolts}$	$b_2 = 0.28274$

Como ejemplo, consideraremos una esfera con los valores de la tabla I.

De la tabla, podemos ver que $\alpha \simeq 1$, $\frac{A}{A_s} = 400$ y $\frac{P_o}{P_d} \simeq 600$. Por lo tanto $\frac{\partial R_d}{\partial m} \simeq 1000$. Con esto encontramos que la incertidumbre en la estimación de R_d puede ser escrita como

$$\delta R_d|_{(m)} \simeq 1000 \delta m. \quad (94)$$

Supongamos que tenemos una incertidumbre en m del 1% entonces $\delta m = 0.001$ por lo tanto $\delta R_d \sim 1$. Este valor de incertidumbre es claramente inaceptable para una cantidad que toma valores entre 0 y 1.

Esto ilustra el hecho de que no es posible hacer estimaciones razonables de la reflectancia o la transmitancia basándonos en las ecuaciones de la potencia detectada en términos de las aberturas de la esfera, de donde se deriva por ejemplo, la ecuación (91).

IV.4 Las constantes de la esfera

En situaciones prácticas, es conveniente expresar las ecuaciones que determinan las potencias recibidas por el detector en las diferentes configuraciones en términos de las llamadas constantes de la esfera, en vez de las aberturas y áreas involucradas. Estos parámetros permiten simplificar las expresiones y aparentemente ayudan a disminuir la incertidumbre en los resultados. En una sección posterior retomaremos este punto y veremos que esto último no es completamente cierto.

Supongamos que tenemos una esfera integradora sin muestra ($R_d = 0$) y que hacemos incidir el haz con potencia P_o sobre la pared, como en la configuración mostrada en la figura 16 (a). En tal situación, la ecuación (76) nos dice que la potencia que recibirá el detector es

$$P_d^{(o)} = \frac{A_\delta}{A} \frac{m}{1 - \alpha m - \frac{A_\delta}{A} r} P_o. \quad (95)$$

Definimos la constante b_1 como la constante de proporcionalidad entre la potencia detectada y la potencia incidente. Es decir que,

$$P_d^{(o)} = b_1 P_o \quad (96)$$

y

$$b_1 = \frac{A_\delta}{A} \frac{m}{1 - \alpha m - \frac{A_\delta}{A} r}. \quad (97)$$

Para definir el valor de la constante de la esfera b_2 procedemos a colocar una muestra de reflectancia $R_d \neq 0$ en la abertura de la muestra. La potencia detectada en este caso

será

$$\begin{aligned}
 P_d &= \frac{A_\delta}{A} \frac{m}{\left[\left(1 - \alpha m - \frac{A_\delta}{A} r\right) - \frac{A_s}{A} R_d \right]} P_o. \\
 &= \frac{A_\delta}{A} \frac{m}{\left(1 - \alpha m - \frac{A_\delta}{A} r\right)} \frac{1}{\left[1 - \frac{A_s}{A} \frac{1}{\left(1 - \alpha m - \frac{A_\delta}{A} r\right)} R_d \right]} P_o, \tag{98}
 \end{aligned}$$

Si definimos a b_2 como (Pickering *et al.*, 1993)

$$b_2 = \frac{A_s}{A} \frac{1}{\left(1 - \alpha m - \frac{A_\delta}{A} r\right)}, \tag{99}$$

la expresión (98) para P_d puede ser escrita en términos de b_1 y b_2 como

$$P_d = b_1 \frac{P_o}{1 - b_2 R_d}. \tag{100}$$

Es decir que, la potencia que llega al detector puede ser escrita de manera compacta en términos de las constantes de la esfera y la reflectancia de la muestra. Veamos, por otro lado, que las constantes de la esfera b_1 y b_2 están definidas por la ecuaciones (97) y (99) en términos de propiedades geométricas de la esfera y algunas reflectancias de elementos de ésta.

La expresión (100) es bastante útil, ya que con base en ella podemos estimar b_2 a partir de los valores conocidos de b_1 , de la reflectancia de un estándar R_{std} y del cociente entre la potencia detectada y la potencia incidente $P_d^{(std)}/P_o$:

$$b_2 = \frac{1}{R_{std}} \left[1 - \frac{b_1}{P_d^{(std)}/P_o} \right]. \tag{101}$$

Ésta es la fórmula que generalmente se emplea para estimar el valor de b_2 .

Por otro lado la expresión (100) también nos permite estimar la reflectancia difusa a partir de los valores de b_1 , b_2 y el cociente de la potencia detectada y la potencia

incidente (P_d/P_o). Es decir que

$$R_d = \frac{1}{b_2} \left[1 - \frac{b_1}{P_d/P_o} \right]. \quad (102)$$

IV.4.1 Incertidumbre en los resultados

La expresión anterior aparenta ser una buena manera de estimar la reflectancia bajo iluminación difusa. Aunque esta expresión no involucra a la reflectividad de las paredes, es importante saber cual es su grado sensibilidad a los posibles errores en las estimaciones de las constantes de la esfera o de las potencias detectadas.

A continuación presentaremos una análisis de sensibilidad similar al que aplicamos para la reflectancia en términos de las aberturas para ejemplificar el problema. En este caso sólo consideraremos las incertidumbres en la constante de la esfera b_1 .

La incertidumbre de R_d debida solamente a errores en términos de la constante de la esfera b_1 se puede escribir como

$$\delta R_d|_{(b_1)} = \left| \frac{\partial R_d}{\partial b_1} \delta b_1 \right|. \quad (103)$$

De la ecuación (102) es posible encontrar la derivada parcial que aparece en la expresión anterior,

$$\frac{\partial R_d}{\partial b_1} = -\frac{1}{b_2} \frac{1}{P_d/P_o}. \quad (104)$$

Con los valores de la tabla I podemos ver que $b_2 = 0.28$ y $P_d/P_o \simeq 0.0016$. De manera que $\frac{\partial R_d}{\partial b_1} \simeq 2000$. Entonces

$$\delta R_d|_{(b_1)} \simeq 2000 \delta b_1. \quad (105)$$

Podemos ver que aunque tengamos una incertidumbre pequeña en la determinación de b_1 , por ejemplo en la tercera cifra decimal, de la incertidumbre de la reflectancia será demasiado grande, de manera que la expresión (102) tampoco provee una manera práctica para estimar R_d .

IV.5 Reflectancia y transmitancia en términos de cocientes de potencias

Hemos visto que las constantes de la esfera b_1 y b_2 permiten expresar los resultados de la teoría de las esferas integradoras de forma compacta, pero que en la práctica las expresiones resultantes no son la mejor forma de estimar la reflectancia (o transmitancia) de una muestra. Sin embargo, también hemos visto que las constantes de la esfera nos permiten expresar a la reflectancia en términos de las potencias incidentes detectadas. Como veremos ahora, esto nos da la posibilidad de buscar una mejor forma de estimar las propiedades de reflectancia y transmitancia de un medio.

Por definición, la constante de la esfera b_1 relaciona la potencia detectada de una esfera sin muestra ($P_d^{(o)}$) con la potencia incidente P_o . Es decir que,

$$b_1 = \frac{P_d^{(o)}}{P_o}. \quad (106)$$

Por otro lado, la constante de la esfera b_2 está dada por

$$b_2 = \frac{1}{R_{std}} \left[1 - \frac{b_1}{P_d^{(std)}/P_o} \right], \quad (107)$$

donde R_{std} representa la reflectividad de un estándar y P_d^{std} la potencia detectada al colocar el estándar. Sustituyendo b_1 en la ecuación anterior, podemos reescribirla en términos de las potencias detectadas,

$$b_2 = \frac{1}{R_{std}} \left[1 - \frac{P_d^{(o)}}{P_d^{(std)}} \right]. \quad (108)$$

De la ecuación (102), sabemos que la reflectancia bajo iluminación difusa puede ser escrita como,

$$R_d = \frac{1}{b_2} \left[1 - \frac{b_1}{P_d/P_o} \right].$$

Si ahora sustituimos los valores de b_1 y b_2 en la ecuación anterior obtendremos una expresión que depende solamente de las potencias detectadas y la reflectancia de un estándar,

$$R_d = R_{std} \frac{\left[1 - P_d^{(o)}/P_d\right]}{\left[1 - P_d^{(o)}/P_d^{(std)}\right]}. \quad (109)$$

Esta expresión resulta práctica y conveniente ya que está dada en términos de las potencias detectadas en tres situaciones (sin muestra, con un estándar y con la muestra), además de la reflectancia de un estándar.

Ahora veamos que tan sensible es al error en la estimación de la potencia detectada P_d . Para hacer esto reescribamos la ecuación (109) como

$$R_d = R_{std} \frac{[1 - \rho_d]}{[1 - \rho_{std}]}, \quad (110)$$

donde $\rho_d = P^{(o)}/P_d$ y $\rho_{std} = P^{(o)}/P_d^{(std)}$. La ventaja de definir estos parámetros es que son fáciles de estimar en el arreglo experimental y, a través de mediciones repetidas, podemos estimarlos con un grado de incertidumbre relativamente pequeño. Entonces la incertidumbre debida solamente a errores en el parámetro ρ_d se puede escribir como,

$$\delta R_d|_{(\rho_d)} = \left| \frac{\partial R_d}{\partial \rho_d} \right| \delta \rho_d. \quad (111)$$

Evaluando la derivada parcial anterior, a partir de la ecuación (110) y sustituyéndola en la ecuación (111) encontramos que la incertidumbre relativa en la estimación de la reflectancia debida a una error relativo en ρ_d está dada por

$$\frac{\delta R_d}{R_d} = \frac{\rho_d}{1 - \rho_d} \frac{\delta \rho_d}{\rho_d}. \quad (112)$$

Es claro de esta expresión que la incertidumbre será muy alta para muestras con valores de reflectancia pequeños ($\rho_d \sim 1$). Sin embargo, para una muestra con reflectividad casi uno el valor de ρ_d para las esferas utilizadas resulta ser de alrededor de 0.8 lo que

nos lleva a tener errores del alrededor del 4%. Esto nos lleva a concluir que esta es una buena forma de hacer estimaciones de reflectancia.

Para el caso de iluminación direccional sobre la muestra, la potencia detectada se puede escribir como,

$$P_{cd} = b_1 \frac{R_{cd} P_1}{1 - b_2 R_d}. \quad (113)$$

Por generalidad denotamos la potencia incidente como P_1 , que puede ser distinta a la potencia P_o del caso anterior. Esta ecuación involucra dos incógnitas; la reflectancia bajo iluminación difusa R_d y la directa R_{cd} (suponiendo que conocemos el valor de las constantes de la esfera b_1 y b_2). Tomando ahora el cociente entre las ecuaciones (113) y (100), es posible escribir la reflectancia R_{cd} de la siguiente forma

$$R_{cd} = m \frac{P_{cd} P_1}{P_d P_o}. \quad (114)$$

Esta expresión es conveniente para mediciones pues, de las propiedades de la esfera, solamente involucra la reflectividad de las paredes m . Los cocientes P_{cd}/P_d y P_1/P_o se pueden medir fácilmente al hacer incidir un haz direccional sobre la muestra o la pared de la esfera.

Cabe decir que es posible llegar a la misma expresión a partir de las ecuaciones (76) y (83) pero las manipulaciones algebraicas son más sencillas usando las expresiones en términos de las constantes de la esfera. Kortum (1969) encuentra una expresión similar partiendo de las expresiones del primer trabajo de Taylor sobre la teoría de las esferas (Taylor, 1920).

Además de las ventajas prácticas, el uso de expresiones en términos de potencias detectadas es menos sensible a errores que las fórmulas encontradas en las secciones anteriores. Para ejemplificar consideremos la incertidumbre en la estimación de R_{cd} ocasionada solamente por la incertidumbre en la reflectividad de las paredes de la

esfera,

$$\delta R_{cd}|_{(m)} = \left| \frac{\partial R_{cd}}{\partial m} \right| \delta m. \quad (115)$$

Partiendo de las ecuaciones (114) y (115) encontramos que,

$$\frac{\delta R_{cd}}{R_{cd}} = \frac{\delta m}{m}. \quad (116)$$

Es fácil ver que los cocientes de potencias siguen una relación similar. Por lo tanto la incertidumbre relativa de R_{cd} puede ser tan pequeña como el error en la determinación de los cocientes de potencias y la reflectividad m .

Es claro que es más sencillo realizar mediciones al iluminar la muestra de manera directa. Sin embargo, generalmente las estimaciones de reflectancia involucran iluminación difusa. En este caso, es más muy difícil tener estimaciones confiables de la reflectancia.

En la literatura de las esfera existen distintas configuraciones que nos permiten determinar la reflectancia y transmitancia de un medio no homogéneo. La configuración de dos esferas integradoras ha sido una de las más empleadas en las últimas dos décadas. Sin embargo, este arreglo de esferas tampoco ofrece una mejora interesante en lo que respecta a la incertidumbre en los resultados. Por otro lado, las expresiones involucradas para estimar la reflectancia y transmitancia son mucho más complicadas que las obtenidas con una sola esfera.

Capítulo V

Caracterización óptica del esqueleto de Coral

Los arrecifes coralinos son ecosistemas marinos con una gran diversidad de flora y fauna. La vida del arrecife depende directamente de la supervivencia del coral que, físicamente, está compuesto por tres partes: las algas microscópicas, el polipo y el esqueleto. Las algas viven en simbiosis con el polipo, un animal de la familia de los cnidarios. Como producto de la simbiosis los corales obtienen los ingredientes necesarios para producir el carbonato de calcio con el que forma el esqueleto. El esqueleto está formado por cristales de aragonita y con ellos se forma la estructura calcárea que soporta al sistema arrecifal. El esqueleto tiene pequeñas cavidades en su superficie (ver figuras 1 y 18), en las que el polipo guarda sus tentáculos durante el día y los saca a ciertas horas de la noche. La forma y los detalles de estas cavidades dependen de la especie. El esqueleto de coral tiene un función protectora, ofreciendo al polipo hogar y refugio. Sin embargo, ahora sabemos que el esqueleto juega también otro papel muy importante en la vida del coral. Gracias a que el esqueleto de coral es un medio altamente difusor y tiene una baja absorción, se propician los efectos de esparcimiento múltiple que traen como consecuencia un aumento en el ambiente de luz dentro de las cavidades del esqueleto, favoreciendo así el proceso de absorción de las algas fotosintéticas (Enríquez *et al.*, 2005).

Para entender los detalles de este incremento de la absorción de las algas, es necesario conocer las propiedades de esparcimiento del esqueleto y hacer un modelo de la



Figura 18. Esqueletos de coral. Los tamaños pueden variar pero la separación entre septos es de alrededor de 1 mm.

interacción de la luz con el esqueleto y con las microalgas. En este capítulo se presenta la metodología empleada para la caracterización óptica de algunos esqueletos de coral.

Para estimar las propiedades ópticas inherentes del esqueleto de coral es necesario primero medir la reflectancia y transmitancia de una rebanada para, con esta información, utilizar una técnica inversa basada en el método Monte Carlo con el que estimamos los coeficientes de absorción y esparcimiento μ_a y μ'_s .

V.1 Descripción del arreglo experimental

El análisis de sensibilidad realizado en el capítulo IV para una esfera integradora nos permite ahora proponer un arreglo experimental para medir las propiedades del esqueleto de manera confiable. Este arreglo está compuesto por una esfera integradora, en la que se usan tres haces incidentes de manera secuencial. Dos iluminan directamente a la muestra y el otro incide primero sobre la pared de la esfera. Esto nos permitirá medir la reflectancia y la transmitancia con el mismo arreglo. La Figura 19 nos muestra un diagrama esquemático del arreglo propuesto. El haz 1 incide directamente sobre la pared de la esfera de forma que generará una iluminación a la que la muestra responderá con una reflectancia R_d . El haz 2 también incide directamente sobre la muestra generando una respuesta inicial de la muestra caracterizada por la reflectancia R_{cd} .

Finalmente, el haz 2 incide desde la parte exterior de la muestra generando una iluminación en la esfera que está determinada por el coeficiente de transmitancia T_{cd} . Las potencias incidentes de estos haces se denotan por P_1 , P_2 y P_3 , respectivamente. Las mediciones se realizan de manera secuencial, bloqueando dos de estos haces a la vez. Lo que nos lleva a tener el siguiente conjunto de ecuaciones,

$$P_d = \frac{A_\delta}{A} \frac{mP_1}{1 - \left(m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r \frac{A_\delta}{A} \right)}, \quad (117)$$

$$P_r = \frac{A_\delta}{A} \frac{R_{cd}P_2}{1 - \left(m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r \frac{A_\delta}{A} \right)}, \quad (118)$$

$$P_t = \frac{A_\delta}{A} \frac{T_{cd}P_3}{1 - \left(m\alpha + R_d \frac{A_s}{A} + r \frac{A_\delta}{A} \right)}, \quad (119)$$

donde P_d es la potencia detectada por el fotodetector al considerar la iluminación del haz 1 (bloqueando el resto), P_r y P_t son las potencias correspondientes a los haces 2 y 3. De las ecuaciones anteriores es fácil encontrar expresiones sencillas para la reflectancia y la transmitancia,

$$R_{cd} = m \frac{P_r P_1}{P_d P_2} \quad (120)$$

y

$$T_{cd} = m \frac{P_t P_1}{P_d P_3}. \quad (121)$$

De esta manera, no es necesario estimar la reflectancia R_d que como hemos visto resulta problemático. Estas expresiones son adecuadas para la estimación práctica de R_{cd} y T_{cd} , como ya se discutió en el capítulo IV. Cabe mencionar que las contribuciones a la incertidumbre relativa de T_{cd} y R_{cd} se dan con igual peso para cada uno de los factores involucrados (el cociente de las potencias detectadas, el de las potencias incidentes y la reflectancia de las paredes) debido a la forma de las ecuaciones.

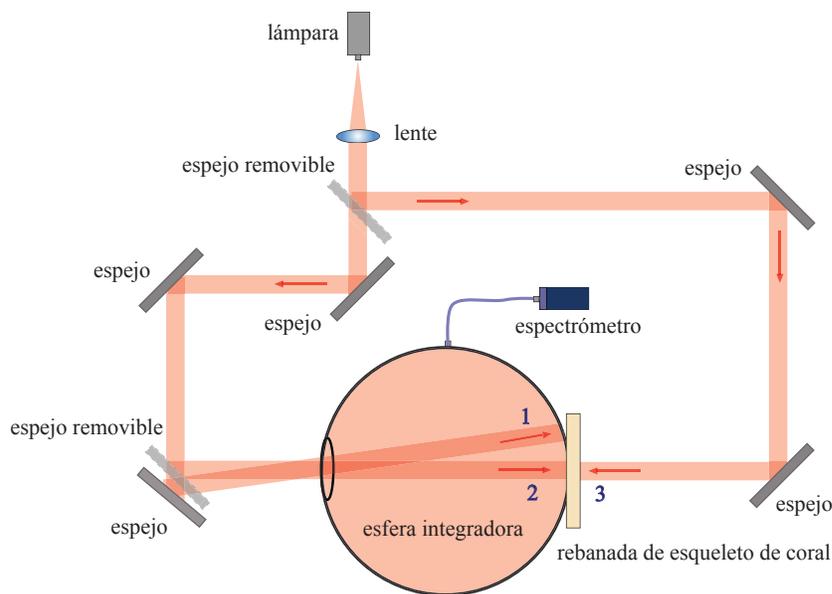


Figura 19. Arreglo esquemático de una esfera integradora con tres haces incidentes.

Para estimar la reflectancia y transmitancia del esqueleto, usamos una esfera integradora SphereLabs con un diámetro de 6 pulgadas y una reflectividad en las paredes $m = 0.98$. La abertura de la muestra y la abertura de entrada tienen un diámetro de 8 mm. Un espectrofotómetro OceanOptics USV 4000 UV-VIS, conectado a la esfera por una fibra óptica, fue usado como detector. El núcleo de la fibra óptica tiene un diámetro de $400 \mu\text{m}$. Como fuente de iluminación usamos una lámpara de luz blanca Oriol modelo 550, y una lente que produce un haz ligeramente convergente sobre la muestra o a la pared de la esfera. El arreglo cuenta con siete espejos, dos de los cuales son removibles. El primer espejo removible determina si iluminamos a la muestra en la geometría de reflexión o transmisión. El segundo, si la iluminación es directa o difusa.

La Figura 19 muestra un diagrama esquemático del arreglo de una esfera y tres haces incidentes. El haz que recorre el brazo izquierdo del arreglo ilumina la muestra para mediciones de reflexión, mientras que el del brazo derecho es para mediciones

de transmisión. Debido a que los tres haces se reflejan tres veces en espejos que son prácticamente idénticos, podemos suponer que las pérdidas son las mismas y que las potencias incidentes son las mismas.

V.2 Técnica de Monte Carlo inversa

Las llamadas técnicas de esparcimiento inversas consisten en deducir las propiedades ópticas de un medio a partir de mediciones de esparcimiento. En este caso, deseamos encontrar los parámetros μ_a , μ_s y g a partir de mediciones de reflectancia y transmitancia, suponiendo que existe una relación uno a uno entre ellas. El método de Monte Carlo (Wang *et al.*, 1995) ya ha sido utilizado por varios autores para deducir las propiedades ópticas de medios no homogéneos (Yaroslavsky *et al.*, 1996; Ligon *et al.*, 1996; Palmer *et al.*, 2006). Básicamente, la idea es la siguiente: se inicia con un cálculo en el que se propone una rebanada de un medio no homogéneo de espesor fijo y se proponen ciertas propiedades ópticas inherentes. Utilizando el método de Monte Carlo, se obtienen los coeficientes de reflectancia y transmitancia: R_{MC} y T_{MC} . Si estas cantidades son iguales, bajo cierto rango de tolerancia, a los valores experimentales de reflectancia y transmitancia (R_{meas} y T_{meas}) la búsqueda termina. Si no, se repite el procedimiento hasta encontrar unos valores de μ_a , μ_s y g adecuados.

Para reducir el número de variables de búsqueda trabajamos con un medio isotrópico equivalente cuyas propiedades están determinadas por μ_a y μ'_s ($g' = 0$). Así, en vez de tres variables (μ_a, μ_s, g) buscamos sólo μ_a y μ'_s debido a que el parámetro de anisotropía de este medio es cero ($g' = 0$). Por conveniencia, exploramos el espacio de soluciones en términos del albedo reducido $a' = \mu'_s / (\mu'_s + \mu_a)$ y el espesor óptico $\tau' = d(\mu'_s + \mu_a)$, donde d es el espesor de la rebanada.

El procedimiento descrito constituye la solución de un problema de optimización. Para guiar las nuevas propuestas de parámetros a y τ utilizamos una estrategia de optimización llamada *down-hill simplex*, desarrollado por Nelder y Mead (1965).

El método de Nelder y Mead utiliza un simplex para encontrar un mínimo local de una función de muchas variables. Para dos variables, un simplex es un triángulo y el método es un modelo de búsqueda que compara los valores de la función de costo en los tres vértices del triángulo. El peor vértice, donde la discrepancia es mayor, es rechazado y remplazado por un vértice nuevo. Los valores de la función de costo en estos 3 vértices son utilizados para decidir la dirección en la que se buscará el nuevo vértice. De esta manera, se forma un triángulo nuevo y la búsqueda continúa. El proceso genera una secuencia de triángulos, para los cuales los valores de la función de costo (en los vértices) van siendo más y más pequeños. El tamaño de los triángulos se va reduciendo hasta colapsarse en las coordenadas del punto que representa el mínimo de la función de costo.

V.2.1 El espacio computacional

En el libro de recetas numéricas de Press et al (1986) se presenta una implementación del método de Nelder y Mead (programa AMOEBA), en el que los parámetros varían de $-\infty$ a ∞ . Sin embargo, el albedo y el espesor óptico tienen los siguientes rangos,

$$0 < a' < 1,$$

$$0 < \tau' < \infty,$$

por lo que es necesario transformarlos para trabajar en un “espacio computacional” adecuado. La función de transformación para el albedo es (Prahl *et al.*, 1993)

$$a'_{comp} = \frac{2a' - 1}{a'(1 - a')}. \quad (122)$$

Así, cuando a' varía entre 0 y 1, a'_{comp} varía entre $-\infty$ y ∞ . Por otro lado, la transformación para el espesor óptico τ' es

$$b = \ln(\tau'). \quad (123)$$

Vemos que estas transformaciones nos llevan al espacio deseado y que son invertibles, de manera que uno puede obtener las propiedades ópticas en términos de los valores computacionales. Para este estudio todos los cálculos fueron hechos usando los valores reales (a', τ') y los valores transformados fueron usados solamente para escoger el siguiente punto de la iteración.

V.2.2 Los valores iniciales

El conjunto inicial de propiedades ópticas seleccionadas determina tanto la rapidez de convergencia, como la posibilidad de convergencia a los valores correctos. Entre más cercanos sean los valores iniciales a los valores óptimos, mayor será la probabilidad de encontrar el resultado correcto y menor será el número de iteraciones requeridas. Una mala selección inicial puede causar que el algoritmo de minimización converja a un mínimo local en vez de a un mínimo global. Debido a que el mínimo global corresponde a la solución deseada, debemos evitar los mínimos locales.

No es posible dar una regla sencilla sobre como escoger el par de propiedades ópticas que dan inicio al proceso de optimización dados los valores experimentales de la reflectancia y la transmitancia. Para facilitar la selección de los valores iniciales de a' y τ' , construimos un mapa de reflectancia y transmitancia en el que se graficarán curvas con igual a' y τ' , manteniendo la otra variable constante.

La Figura 20 muestra tal mapa. Los valores de R y T se obtuvieron con el programa de Monte Carlo, utilizando valores de albedo (a') y espesor óptico (τ'). De este mapa

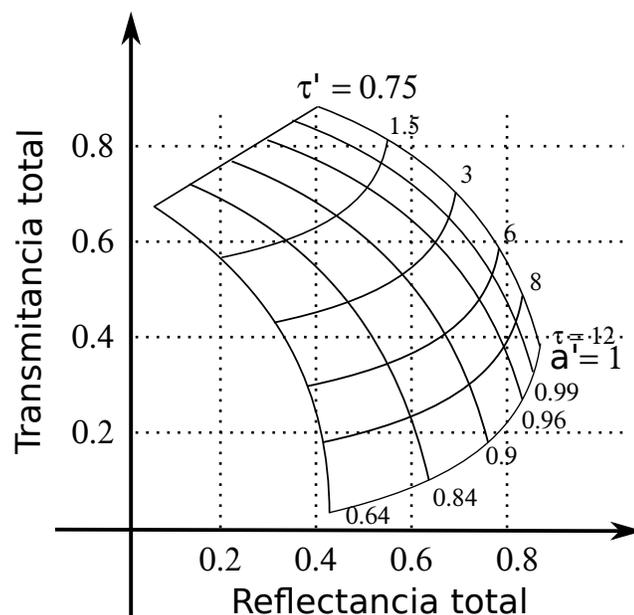


Figura 20. Mapa de reflectancia y transmitancia.

de puntos, se escogen valores iniciales de a' y τ que lleven a valores de reflectancia y transmitancia cercanos a los medidos experimentalmente.

V.3 Caracterización de una muestra de teflón

Antes de probar esta técnica con el esqueleto de coral, hicimos pruebas con materiales que son homogéneos estadísticamente y que pueden ser cortados fácilmente en rebanadas de distintos espesores.

El politetrafluoretileno¹, conocido comúnmente como teflón, es un material sólido altamente difusor y de color blanco. En esta sección describiremos el uso de bloques de este material en la determinación de sus propiedades aparentes (reflectancia y transmitancia) e inherentes (μ_a , μ'_s). Usando muestras de diferente espesor (d) haremos pruebas de consistencia del método descrito en la sección anterior.

¹Generalmente de un material de este tipo están recubiertas las paredes de las esferas integradoras.

Se cortaron 3 bloques cuadrados de teflón con una sección transversal de 5cm por 5cm, en piezas de los siguientes espesores: 2.5mm, 3.3mm y 5.9mm. Las llamaremos la muestra delgada, media y gruesa, respectivamente.

Se utilizó un arreglo de una esfera y tres haces incidentes para obtener los espectros de reflectancia (ver Figura 19)

$$R = m \frac{P_r P_2}{P_d P_1}$$

y transmitancia

$$T = m \frac{P_t P_3}{P_d P_1},$$

donde $m = 0.98$ es la reflectividad de las paredes de la esfera (dato del fabricante), P_{d1} es la potencia detectada al iluminar con el haz 1 (iluminación difusa en reflectancia), P_{d2} es la potencia detectada al iluminar con el haz 2 (iluminación directa en reflectancia), P_{d3} es la potencia detectada al iluminar con el haz 3 (iluminación directa en transmitancia). Las potencias incidentes de cada haz se denotan por: P_1 , P_2 y P_3 , respectivamente. Las potencias detectadas fueron obtenidas de manera sucesiva dejando pasar sólo un haz.

Debido a que solamente usamos una fuente para iluminar la muestra y que los tres haces se reflejan en el mismo número de espejos, podemos suponer que la potencia incidente para los tres haces es la misma ($P_1 = P_2 = P_3$).

La Figura 21 muestra el espectro de reflectancia de las muestras de teflón. Aunque el espectrofotómetro nos da un rango de longitudes de onda más extenso, mostramos solo el espectro en la región visible (400 – 700nm). Podemos ver como el espectro en los tres casos el espectro es casi plano, lo que explica el color blanco del teflón. La figura 22 muestra el espectro de transmitancia de las muestras de teflón. En estos espectros podemos notar como, a partir de los 450nm, los valores de transmitancia decaen rápidamente y después permanecen casi constantes. La Figura 23 muestra el

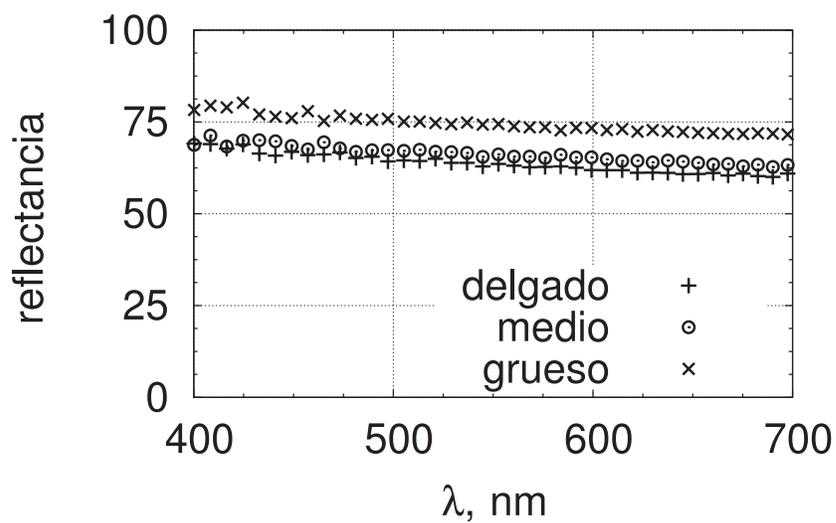


Figura 21. Espectro de reflectancia de las muestras de teflón.

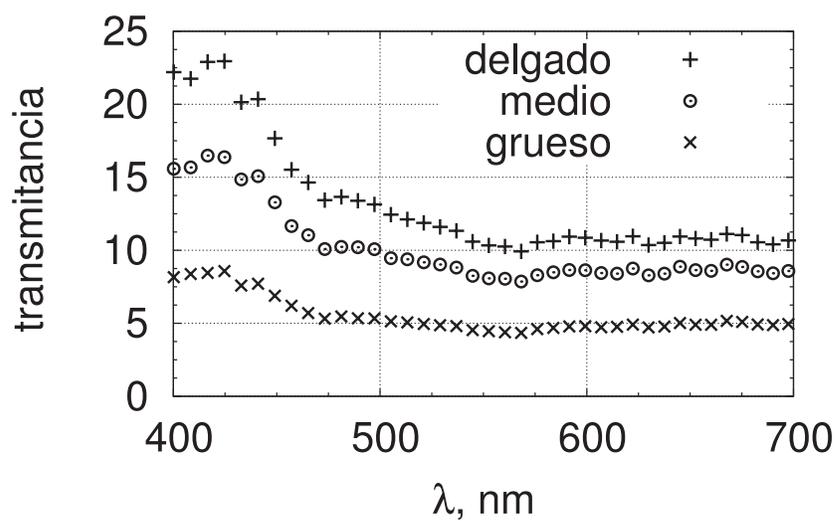


Figura 22. Espectro de transmitancia de las muestras de teflón.

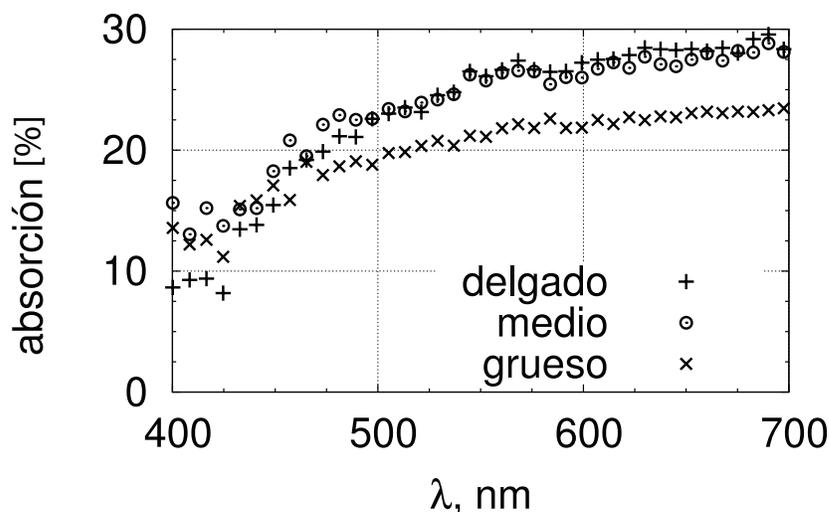


Figura 23. Espectro de absorción de las muestras de teflón.

espectro de absorción de las muestras de teflón. Podemos ver que los espectros de las muestras delgada y media son muy parecidos.

La técnica inversa de Monte Carlo nos permite obtener las propiedades ópticas inherentes (μ_a y μ'_s) del medio a partir de las propiedades de reflectancia, transmitancia y del espesor de las rebanadas de teflón.

La tabla II muestra los valores de μ_a (coeficiente de absorción) determinados con las tres muestras de teflón examinados, utilizando el método de Monte Carlo inverso. Dado que el material es el mismo, se esperaría que obtener valores equivalentes en los tres casos. Recordemos que la muestra 1 (delgada) tiene un espesor de 2.5mm, la muestra 2 (media) tiene un espesor de 3.3mm y la muestra 3 (gruesa) tiene un espesor de 5.9mm. Los valores citados para μ_a representan un promedio en el que se tomaron variaciones de medio milímetro alrededor de espesor nominal, bajo la suposición que la reflectancia y transmitancia tienen valores constantes. Recordemos que el programa Monte Carlo inverso necesita como parámetros de entrada la reflectancia (R), la transmitancia (T)

Tabla II. 1.0.5 Propiedades ópticas inherentes de una muestra de teflón.

Muestra	delgada [cm^{-1}]	Media [cm^{-1}]	Gruesa [cm^{-1}]
μ_a	0.6	0.59	0.27
μ'_s	20.1	20.15	20.0

y el espesor del medio (d).

El coeficiente de absorción calculado con las muestras 1 y 2 es muy similar. Sin embargo, se presenta una discrepancia notable con el valor calculado la muestra 3. Este comportamiento se debe posiblemente a que para la muestra más gruesa la transmitancia es menor y las mediciones son más susceptibles al ruido de detección.

En la tabla II se muestran los valores de μ'_s (coeficiente de esparcimiento reducido) estimados con estas tres muestras de teflón. Las estimaciones del coeficiente de esparcimiento son mucho más consistentes en este caso.

Cabe decir que los coeficientes de absorción y esparcimiento son función de la longitud de onda y que los resultados anteriores fueron obtenidos para $\lambda = 675$ nm. Sin embargo, es posible aplicar el mismo método a una longitud de onda diferente.

Estos resultados nos dan la confianza suficiente en el método utilizado para determinar las propiedades ópticas del esqueleto de coral.

V.4 Caracterización del esqueleto de coral

Un punto muy importante de este trabajo es la determinación de las propiedades ópticas del esqueleto de coral. Para poder modelar la estructura del coral, es necesario determinar las propiedades ópticas del esqueleto. En particular, el coeficiente de absorción (μ_a)

y coeficiente reducido de esparcimiento (μ'_s). Para esto, aplicamos la técnica descrita en las secciones anteriores.

Para medir la reflectancia y la transmitancia del esqueleto, utilizamos el arreglo con la esfera integradora y tres haces incidentes. Estas mediciones permiten, con la técnica inversa, la determinación de las propiedades ópticas del esqueleto.

Para estimar valores típicos y realistas de las propiedades ópticas del esqueleto, utilizamos cuatro muestras diferentes. Tres, son esqueletos de la especie porites (muestras etiquetadas como X, Y y Z). La cuarta es de una especie que desconocemos (etiquetada como C1). La muestra X tiene un espesor de 3mm, la muestra Y tiene un espesor de 2.5mm y la muestra Z tiene un espesor de 2.5mm. Todas las muestras tienen un área cuadrada de alrededor $2 \times 2\text{cm}^2$. La muestra C1 tiene un espesor de 2.5mm con una sección transversal similar a las anteriores. Todas las mediciones fueron hechas con las muestras húmedas.

Empleando el arreglo de una esfera y tres haces incidentes obtuvimos los espectros de reflectancia y transmitancia, con base en las expresiones

$$R = m \frac{P_r P_2}{P_d P_1}$$

y

$$T = m \frac{P_t P_3}{P_d P_1}.$$

Como ya se mencionó, podemos considerar que $P_1 = P_2 = P_3$. Los espectros de absorción se obtuvieron de la relación $A = 1 - R - T$.

La Figura 24 muestra los espectros de reflectancia (R), transmitancia (T) y absorción (A) de una muestra de esqueleto de coral. Por brevedad, y ya que los otros espectros son muy parecidos, sólo presentamos los valores de la muestra Y.

Utilizando el método de Monte Carlo inverso ya descrito, se estimaron las propiedades

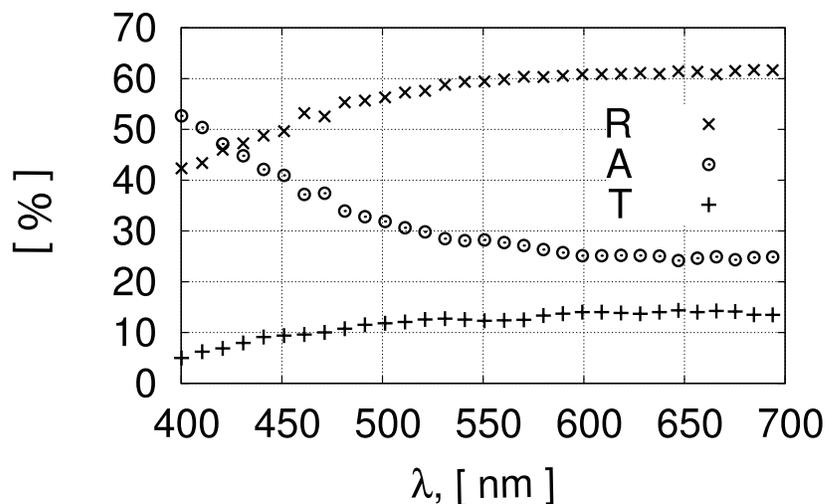


Figura 24. Propiedades ópticas del esqueleto de coral (muestra Y).

ópticas de las muestras X, Y, Z y C1 a partir de los espectros de reflectancia y transmitancia para una longitud de onda $\lambda = 632\text{nm}$.

En la tabla III se muestran las propiedades ópticas de las diferentes muestras consideradas. Debido a que hay pequeñas variaciones en el espesor de la muestra se aplicó la misma metodología que usamos en las muestras de teflón, promediando sobre d con una variación de 0.1mm.

Los resultados muestran una variación importante en el coeficiente de absorción para las cuatro muestras. Esto, a pesar de que tres de ellas son de la misma especie y uno podría pensar que son equivalentes. Sin embargo, debemos tomar en cuenta que las muestras no son homogéneas y que a simple vista se observan diferencias, pues contienen restos de material biológico en su estructura (manchas oscuras) que modifican sus propiedades de absorción. Por otro lado, el coeficiente de esparcimiento es más parecido para las muestras de la misma especie (X, Y y Z), pero es casi un 50% menor para la muestra C1.

Tabla III. 1.0.5 Propiedades ópticas inherentes de esqueletos de coral ($\lambda = 632 \text{ nm}$).

Muestra	X [cm^{-1}]	Y [cm^{-1}]	Z [cm^{-1}]	C1 [cm^{-1}]
μ_a	0.25	0.85	0.26	0.19
μ'_s	12.5	15	14.9	7.78

Debido a la gran variabilidad de especies de coral y tipos de esqueleto, nuestro propósito en esta sección era simplemente encontrar valores típicos o realistas para nuestro modelo de coral. Los resultados encontrados son adecuados para estos propósitos. Para nuestro modelo, adoptaremos los valores,

$$\mu_a = 0.25\text{cm}^{-1} \quad \text{y} \quad \mu'_s = 12.5\text{cm}^{-1}. \quad (124)$$

Capítulo VI

Caracterización óptica de las microalgas

En este capítulo describiremos los experimentos realizados para estimar las propiedades ópticas del tejido que contiene a las células fotosintéticas. Las propiedades ópticas requeridas son el coeficiente de esparcimiento μ_s , el coeficiente de absorción μ_a y el factor de anisotropía g . Como ya lo hemos mencionado, el coeficiente de esparcimiento está definido como la probabilidad de que la luz sea esparcida por unidad de longitud. Similarmente, el coeficiente de absorción es la probabilidad de que la luz sea absorbida por unidad de longitud y el factor de anisotropía es el promedio del coseno del ángulo de esparcimiento.

Conociendo la densidad volumétrica es posible estimar las propiedades ópticas (μ_a , μ_s y g) del tejido a partir de las secciones transversales de absorción y esparcimiento promedio de las células, por lo que nos avocaremos a determinar estas propiedades de partícula.

Cabe decir que, con la técnica utilizada, es posible estimar las propiedades ópticas de cualquier tipo de partículas pequeñas (con diámetros comparables o mayores que la longitud de onda) en una suspensión diluida. En particular, como caso de estudio, estimaremos las propiedades ópticas de microalgas en cultivo de la colección de dinoflagelados simbioses del Dr. Iglesias-Prieto en la Unidad Académica de Sistemas Arrecifales (Puerto Morelos) de la UNAM. En concreto, el estudio se ha realizado en la especie *Symbiodinium kawagutti*. Estas determinaciones nos servirán como referencia de las propiedades ópticas de las microalgas que viven en el tejido del coral (ver figura



Figura 25. Fotografía de las microalgas simbióticas *S. kawagutii*. La barra tiene una longitud de $10 \mu\text{m}$.

25).

La sección transversal de absorción C_a es la constante de proporcionalidad entre la potencia absorbida por la célula y la irradiancia incidente [potencia por unidad de área]. Similarmente, la sección transversal de esparcimiento C_s es la constante de proporcionalidad entre la potencia esparcida por la célula y la irradiancia incidente. La otra cantidad relevante es la sección transversal de extinción, que viene dada por la suma de las secciones transversales de absorción y esparcimiento. Es decir que $C_e = C_a + C_s$.

VI.1 Extinción y absorción

Empezaremos nuestro estudio con la sección transversal de extinción, que es la propiedad más sencilla de estimar. Consideramos un haz de luz con potencia P_o , longitud de onda λ y sección transversal C_b . El haz ilumina una región de espesor dz que contiene células suspendidas con una densidad ρ [partículas/vol]. La extinción es una medida de la potencia perdida debido a esparcimiento y absorción.

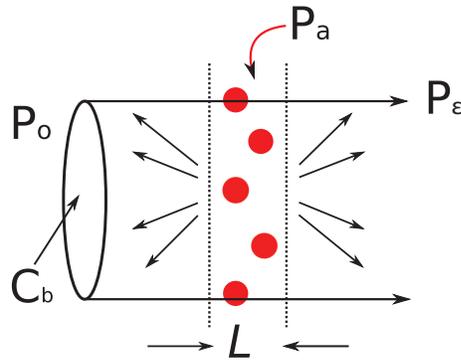


Figura 26. Esquema de la interacción entre la luz y un medio con partículas. La potencia incidente se denota por P_o , la potencia absorbida por P_a y la componente coherente por P_ϵ .

El haz de luz, al pasar a través del medio, se reduce en proporción a la cantidad de luz que es absorbida y esparcida por las células. El cambio en la irradiancia al pasar a través de una rebanada infinitesimal de este medio, está dada por la ecuación (6):

$$dI = -\mu_t I dz.$$

Considerando un medio de espesor L (ver figura 26) esta ecuación diferencial tiene como solución,

$$I = I_o \exp(-\mu_t L).$$

En términos de la potencia y las secciones transversales ($\mu_t = \rho C_e$), podemos escribir

$$P_\epsilon = P_o \exp(-\rho C_e L). \quad (125)$$

donde P_ϵ es la potencia transmitida, que está disminuida debido a las pérdidas por absorción y esparcimiento. Es decir que la potencia “extinguida” sería $P_e = P_o - P_\epsilon$.

Definimos el parámetro $\eta = \rho L = \frac{N}{C_b}$ como el número de células (N) por unidad de área proyectada, lo que nos permite escribir la ecuación anterior como,

$$P_\epsilon = P_o \exp(-\eta C_e). \quad (126)$$

Por otro lado, para estimar las propiedades de absorción del medio es necesario coleccionar la luz que es esparcida en todas direcciones. Supongamos por el momento que podemos hacer esto. Siguiendo entonces un procedimiento similar al que aplicamos en el caso de extinción encontramos que la potencia detectada sería,

$$P_\alpha = P_o \exp(-\eta C_a), \quad (127)$$

donde C_a es la sección transversal de absorción. La potencia absorbida es entonces $P_a = P_o - P_\alpha$.

Partiendo de estimaciones experimentales de P_ϵ y P_α , y de las expresiones (126) y (127), es posible encontrar las secciones transversales de extinción y de absorción de las células. Escribimos entonces que

$$C_a = \frac{1}{\eta} \ln \left[\frac{P_\alpha}{P_o} \right] \quad (128)$$

y

$$C_e = \frac{1}{\eta} \ln \left[\frac{P_\epsilon}{P_o} \right], \quad (129)$$

donde $\eta = \rho L$. Con esto, es posible encontrar la sección transversal de esparcimiento,

$$C_s = C_e - C_a. \quad (130)$$

Vemos que las secciones transversales de absorción y extinción están dadas en términos del cociente de las potencias detectadas y el parámetro η . Las estimaciones de C_e y C_a dependen entonces de la precisión con la que hagamos tanto las mediciones de potencias como el conteo de las células. Para conocer el error involucrado en las estimaciones de C_a y C_s es necesario conocer la sensibilidad de estos parámetros a la incertidumbre en la medición de η y P_d/P_o .

VI.1.1 Incertidumbre en la determinación de las secciones transversales

En esta sección presentaremos un análisis de la propagación de la incertidumbre en la estimación de la sección transversal de absorción y extinción usando la teoría descrita por Taylor (1997).

Las secciones transversales de absorción y extinción se determinan por expresiones de la forma,

$$C_x = -\frac{\ln(X)}{\eta}, \quad (131)$$

donde X denota una razón entre potencias y $\eta = \rho L$. El parámetro X depende, de manera indirecta, del espesor óptico del medio. Para un medio muy diluído $X \rightarrow 1$ y para un medio muy denso $X \rightarrow 0$.

La teoría de tratamiento de errores (Taylor, 1997) nos permite calcular la propagación de la incertidumbre de los parámetros η y X en la incertidumbre en la determinación de la sección transversal C_x a través de la expresión

$$\delta C_x = \sqrt{\left[\frac{\partial C_x}{\partial X} \delta X\right]^2 + \left[\frac{\partial C_x}{\partial \eta} \delta \eta\right]^2}, \quad (132)$$

donde δC_x denota la incertidumbre de C_x , y δX y $\delta \eta$ son las incertidumbres de los parámetros X y η , respectivamente.

De la ecuación (131) vemos que las derivadas parciales de C_x con respecto a X y η están dadas por

$$\frac{\partial C_x}{\partial X} = -\frac{1}{\eta X} \quad (133)$$

y

$$\frac{\partial C_x}{\partial \eta} = \frac{C_x}{\eta}. \quad (134)$$

Sustituyendo las ecuaciones (133) y (134) en la ecuación (132) tenemos que

$$\delta C_x = \sqrt{\left[\frac{1}{\eta} \frac{\delta X}{X}\right]^2 + \left[C_x \frac{\delta \eta}{\eta}\right]^2}. \quad (135)$$

Al dividir la ecuación anterior entre C_x obtenemos la incertidumbre fraccional,

$$\frac{\delta C_x}{C_x} = \sqrt{e_1 + e_2} \quad (136)$$

donde

$$e_1 = \left[-\frac{1}{\ln(X)} \frac{\delta X}{X}\right]^2 \quad (137)$$

y

$$e_2 = \left[\frac{\delta \eta}{\eta}\right]^2. \quad (138)$$

Podemos ver que la incertidumbre relativa de C_x depende no solamente de las incertidumbres relativas de η y X , si no también de la magnitud del parámetro X .

Vemos que si $X \ll 1$ (muestra muy densa), $e_1 \rightarrow 0$ y el error estará dominado por e_2 . En este caso, el error relativo de C_x sería igual al error relativo de $\delta \eta$. Es decir, que si se trabaja con una muestra muy densa, los errores en la estimación de la potencia resultan poco importantes para la estimación de la sección transversal y más bien es necesario cuidar el error en la determinación de la densidad de partículas. Sin embargo, esta situación tiene la desventaja de que para un medio muy denso el esparcimiento múltiple se vuelve dominante y las expresiones (126) y (127) podrían no ser válidas.

En el caso opuesto, para un medio diluido ($X \rightarrow 1$) el error importante estará dado por e_1 y sería grande, por lo que esta situación debe evitarse. Podemos decir que, para un medio con $X \leq 0.1$, el factor dominante será η , mientras que para valores de $X > 0.65$ las incertidumbres de X empezarán a dominar el error en la sección transversal.

VI.2 El factor de anisotropía

La estimación de la anisotropía (g) involucra normalmente la medición de la distribución angular de la luz esparcida. Sin embargo, veremos que es posible estimar este parámetro de manera aproximada utilizando esferas integradoras.

Para un medio muy diluído podemos suponer que las células esparcen de manera independiente unas de otras y no hay efectos de sombreado ni de esparcimiento múltiple. En este caso, es posible relacionar de manera aproximada la transmitancia, la reflectancia y la absorción del medio con las propiedades de anisotropía de una célula. A continuación presentamos un análisis para justificar esta aseveración.

Supongamos que tenemos un medio con partículas que tienen una función de fase $P(\theta, \phi)$. Debe entonces cumplirse que

$$\int_{4\pi} P(\theta, \phi) d\Omega = 1. \quad (139)$$

Si esta distribución de partículas produce un patrón de esparcimiento isotrópico alrededor de ϕ , tenemos que

$$2\pi \int_0^{2\pi} P(\theta) \sin \theta d\theta = 1. \quad (140)$$

Con el cambio de variable $x = \cos \theta$ la integral se simplifica y podemos escribir

$$\int_{-1}^1 p(x) dx = 1, \quad (141)$$

donde la función $p(x) = 2\pi P(\cos^{-1} x)$.

El parámetro de anisotropía está definido como el primer momento de la función de fase. Es decir que,

$$g = \int_{-1}^1 xp(x) dx. \quad (142)$$

Dado que $x = \cos \theta$, g representa el promedio del coseno del ángulo de esparcimiento (como ya lo hemos mencionado).

La fracción de luz esparcida que es esparcida hacia adelante está dada por,

$$f = \int_0^1 p(x)dx. \quad (143)$$

Similarmente, la fracción de luz esparcida que sale hacia atrás es

$$b = \int_{-1}^0 p(x)dx. \quad (144)$$

y se debe cumplir que $f + b = 1$.

Escribimos ahora,

$$g = g_f + g_b \quad (145)$$

donde

$$g_f = \int_0^1 xp(x)dx \quad (146)$$

y

$$g_b = \int_{-1}^0 xp(x)dx. \quad (147)$$

Consideramos primero el caso de partículas grandes. En este caso, el esparcimiento es primordialmente a ángulos pequeños, ya sea hacia adelante o hacia atrás. Para estos ángulos $x = \cos \theta \simeq \pm 1$, de manera que $g_f \simeq f$ y $g_b \simeq -b$.

Con esta aproximación tenemos que

$$f - b = g. \quad (148)$$

Utilizando la condición,

$$f + b = 1, \quad (149)$$

y resolviendo para f y g , tenemos que la fracción de luz esparcida hacia adelante se puede escribir como

$$f = \frac{1 + g}{2} \quad (150)$$

muestras que fracción de luz esparcida hacia atrás es,

$$b = \frac{1 - g}{2}. \quad (151)$$

Podemos ver que un valor de $g = 1$ (toda la luz esparcida hacia adelante) resulta en $f = 1$ y $b = 0$. Por otro lado, con $g = -1$ (toda la luz esparcida hacia atrás) obtenemos $f = 0$ y $b = 1$. Todo esto concuerda con lo esperado.

Por otro lado, para partículas pequeñas se tiene esparcimiento isotrópico. En este caso, $p(x) = p(-x)$, $g = 0$ y $f = b = 1/2$. Vemos que este resultado también está de acuerdo con la aproximación (150) y (151). Esto sugiere que estas aproximaciones, que fueron motivadas por una aproximación para partículas grandes, pueden ser razonables para partículas de otros tamaños.

Es claro que la validez de estas expresiones para valores intermedios de g depende de la función de fase, pero es interesante explorarlas para el caso de la función de fase de Henyey-Greenstein. La figura 27 muestra el comportamiento de los valores de f y b calculadas con las expresiones (150) y (151) (línea sólida) y los valores calculados con base en la función de fase de Henyey-Greenstein (línea punteada). Como era de esperarse, las curvas coinciden en los límites $g = -1$ y $g = 1$, así como en el punto central $g = 0$. Sólo hay pequeñas desviaciones para otros valores de g . Esto da cierta confianza en la aproximación representada por las expresiones (150) y (151), que también implican que $g = f - b$.

Esto muestra la posibilidad de estimar el factor anisotropía g en términos de las propiedades de reflectancia y transmitancia del medio diluido. Es decir, sin necesidad de realizar mediciones angulares de esparcimiento.

Sabemos que, por definición, la absorción (A), la reflectancia (R) y la transmitancia

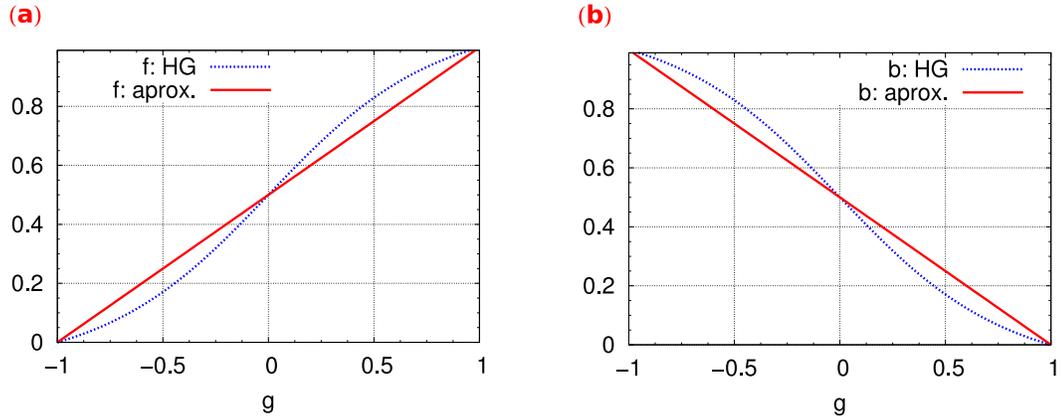


Figura 27. Comparación entre los valores de f y b con la aproximación $x \simeq \pm 1$ (línea recta) y con la función de fase de Henyey-Greenstein.

(T) satisfacen

$$\mathcal{A} + \mathcal{R} + \mathcal{T} = 1. \quad (152)$$

Otra forma de escribir esta relación es,

$$\frac{\mathcal{T}}{1 - \mathcal{A}} + \frac{\mathcal{R}}{1 - \mathcal{A}} = 1. \quad (153)$$

La razón de hacer esto es hacer patente que esto es equivalente a la condición $f + b = 1$, con lo que tenemos que

$$f = \frac{\mathcal{T}}{1 - \mathcal{A}}, \quad b = \frac{\mathcal{R}}{1 - \mathcal{A}}. \quad (154)$$

Vemos entonces que es posible determinar el valor de g a través de mediciones de los coeficientes de transmitancia y reflectancia. Es decir,

$$g = \frac{\mathcal{T} - \mathcal{R}}{\mathcal{T} + \mathcal{R}}. \quad (155)$$

Cabe señalar que para esto estamos suponiendo que tenemos un medio suficientemente diluido como para tener solamente esparcimiento sencillo, además de poder colectar toda la luz transmitida y reflejada.

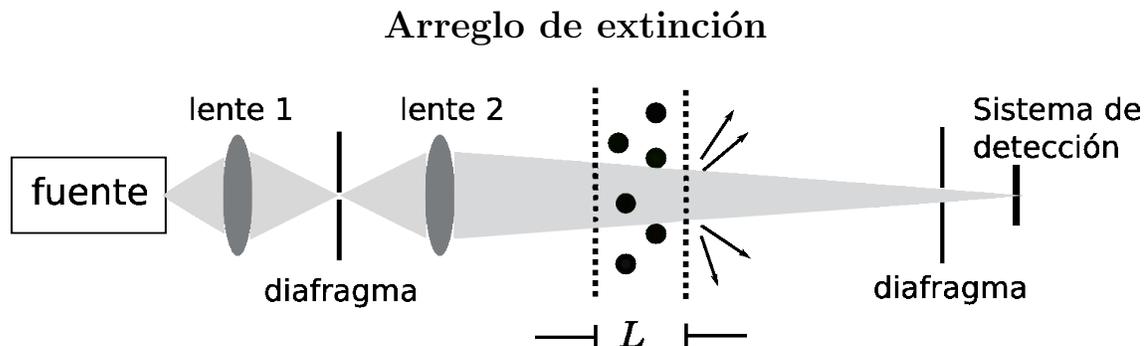


Figura 28. Diagrama esquemático de un arreglo experimental para medir la sección transversal de extinción.

VI.3 Arreglos experimentales

En esta sección se describen los arreglos experimentales utilizados para estimar la sección transversal de extinción, la sección transversal absorción y el factor de anisotropía. Para esto, se utilizaron dos arreglos experimentales. Mientras que para el arreglo de extinción necesitamos bloquear toda la luz esparcida, para el arreglo de absorción y anisotropía debemos colectar la luz esparcida en todas direcciones.

Las mediciones de extinción requieren que toda la luz esparcida sea bloqueada. Esto se puede lograr separando la muestra (medio esparcidor) del sistema de detección (que está sobre el eje óptico) por una distancia considerable. En la figura 28 se muestra un diagrama esquemático del arreglo experimental utilizado para medir las propiedades de extinción de las partículas. Como fuente de iluminación se utilizó una lámpara de luz blanca Ocean Optics modelo HL-2000. Para el sistema de detección se utilizó un espectrofotómetro Ocean Optics USB4000 UV-VIS.

La luz que emerge de la lámpara se enfoca por la lente 1 sobre una abertura de un 1 mm de diámetro, que sirve como fuente secundaria. La lente 2, que tiene una distancia focal $f = 75\text{mm}$, se utilizó para formar una imagen de esta fuente secundaria sobre la

abertura de entrada al espectrofotómetro. Aunque es posible usar sólo una lente para iluminar la muestra, el tener dos lentes nos permite variar las distancias conjugadas (distancias entre el objeto y la lente, y la lente y la imagen) del sistema para aumentar la distancia entre la muestra y la abertura de entrada del detector.

La celda con las células se coloca en el camino entre la segunda lente y el sistema de detección. La celda es entonces iluminada por un haz ligeramente convergente que, sobre la celda, tiene una sección transversal con un diámetro de 1cm. La celda y el sistema de detección se debe separar lo más posible para minimizar la cantidad de luz esparcida que entra al sistema de detección. De esta manera estimamos la cantidad de luz que pasa sin ser absorbida o esparcida.

Las mediciones se hacen con referencia a un blanco, o medio sin células, lo cual nos permite medir la potencia de referencia o incidente P_m . Para la celda con células se mide una potencia denotada por P_M . Estas cantidades están relacionadas con la sección transversal de extinción a través de la ecuación (126),

$$P_M = P_m \exp(-\rho C_e L).$$

Resolviendo para la sección transversal de extinción obtenemos

$$C_e = -\frac{1}{\eta} \ln \left(\frac{P_M}{P_m} \right). \quad (156)$$

Para estimar la absorción necesitamos un arreglo experimental más sofisticado, debido a que es necesario capturar toda la luz esparcida. Esto se puede lograr utilizando un arreglo con una esfera integradora y tres haces incidentes, como se muestra en la figura 29. El arreglo fue discutido en el capítulo anterior.

El arreglo nos permite estimar la absorción (\mathcal{A}) partir de las mediciones de la reflectancia (\mathcal{R}) y la transmitancia (\mathcal{T}) del medio. Una vez estimada la absorción, uti-

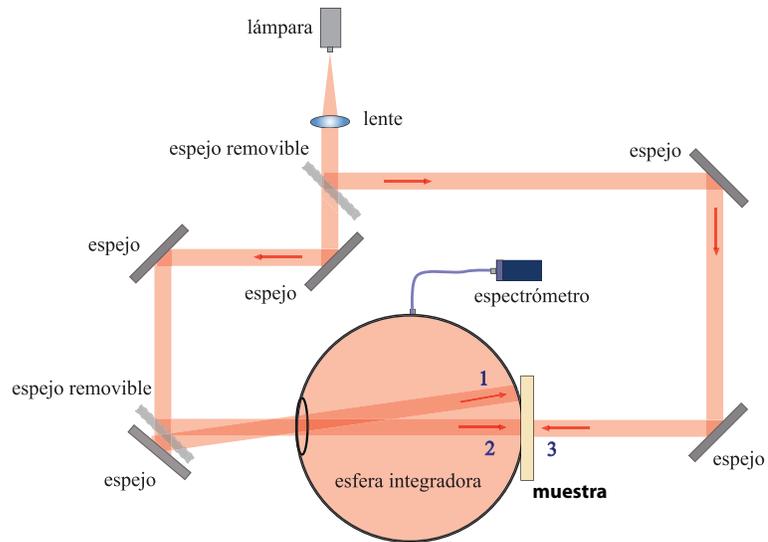


Figura 29. Diagrama esquemático de un arreglo experimental para medir la absorción.

lizamos la relación entre ésta y la sección transversal de absorción de las partículas,

$$\mathcal{A} = \exp(-\rho C_a L).$$

Resolviendo para C_a tenemos,

$$C_a = -\frac{1}{\eta} \ln(\mathcal{A}). \quad (157)$$

Cabe decir que dado que tenemos \mathcal{R} , \mathcal{T} y \mathcal{A} , con este mismo arreglo podemos estimar el parámetro de anisotropía de las células haciendo diluciones del medio. Aunque en principio tendríamos contribuciones espurias en la reflectancia a causa de la interfase aire-plástico de las celdas podemos corregirla utilizando una celda de referencia y eliminando la componente especular de las mediciones.

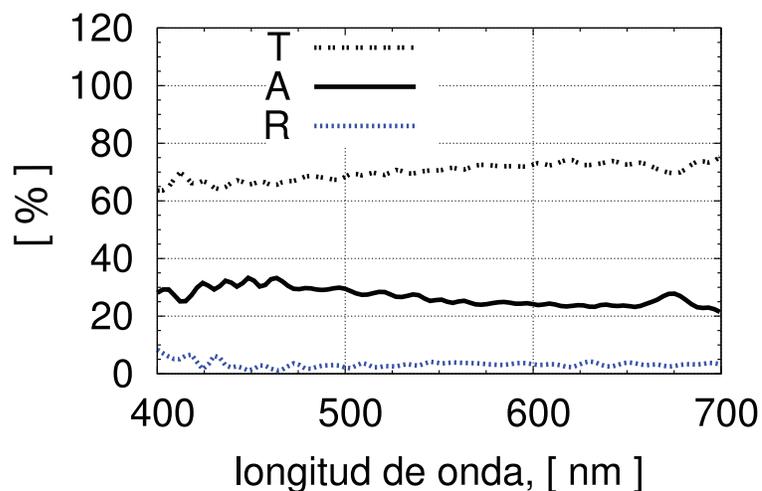


Figura 30. Propiedades ópticas de reflectancia (R), transmitancia (T) y absorción (A) de las células *S. kawagutti*.

VI.4 Resultados

Para reducir en lo posible efectos de esparcimiento múltiple, las muestras consistieron de suspensiones diluídas. Empezamos con una suspensión con densidad conocida de células de *S. kawagutti* ($\rho = 7.48 \times 10^4$ células/ml), que se fue diluyendo de manera sistemática. La celda usada tenía una longitud $L = 1$ cm.

Para los experimentos se colectaron alícuotas de $500\mu\text{l}$ de medio. La densidad de células fue estimada contando nueve réplicas bajo el microscopio con una cámara de Neubauer (hematocitómetro). Inmediatamente después del conteo, las células fueron preservadas en lugol.

La Figura 30 muestra la reflectancia, la transmitancia y la absorción de una suspensión de algas *S. kawagutti* en el intervalo de luz visible (400-700nm), obtenida con el arreglo de la esfera integradora y tres haces. La curva inferior representa la reflectancia, la curva continua la absorción y la curva superior punteada la transmitancia. Podemos ver que la reflectancia es pequeña y prácticamente independiente de la longitud de onda en el espectro visible. Por otro lado las curvas de absorción y transmitancia tienen un

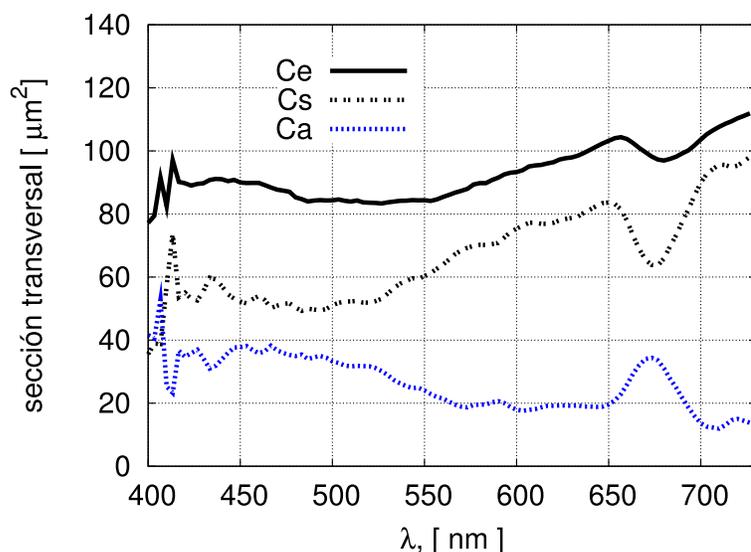


Figura 31. Secciones transversales de absorción (C_a), esparcimiento (C_s) y extinción (C_e) de las microcélulas *S. kawaguttii*.

poco más de estructura. La banda de absorción de la Chla *a* (650-700nm) se aprecia claramente en el espectro de absorción.

En la Figura 31 se muestran los resultados experimentales de las secciones transversales (C_e , C_s and C_a) de las algas en el espectro visible. Vemos que para longitudes de onda cortas ($\lambda \approx 400\text{nm}$), las curvas son más ruidosas. Esto se debe a la baja potencia de la fuente de iluminación en esa zona del espectro, combinada con absorción de las fibras ópticas y la sensibilidad del detector. Centramos entonces nuestra atención en las longitudes de onda más grandes ($\lambda \geq 500\text{ nm}$), y más particularmente alrededor de la banda de absorción de la Chla ($600 \leq \lambda \leq 700\text{nm}$).

La sección transversal de absorción de las células presenta un pico muy bien definido en la banda de absorción de la clorofila *a* (Chla) en el rojo. También se ve la influencia de otros pigmentos a longitudes de onda menores que 550nm. El pico de absorción a $\lambda = 670\text{ nm}$ contrasta con el pronunciado valle de la sección transversal de esparcimiento a esa longitud de onda. También vemos que la sección trasversal de extinción presenta una estructura interesante dentro de la banda de absorción de la Chla en el rojo. Este

comportamiento se puede explicar con un modelo de variación del índice de refracción en la vecindad de una banda de absorción. Para tamaños de partículas similares a las de las microalgas de *S. kawagutti* el comportamiento de las secciones transversales de absorción y esparcimiento que se obtiene mediante cálculos de Mie es similar al observado experimentalmente.

Debido a que el pico de absorción de la Chl*a* influye de manera notable en el proceso de la fotosíntesis para nuestro modelo, escogemos los valores $C_a = 38 \mu\text{m}^2$ y $C_s = 65 \mu\text{m}^2$ para $\lambda = 675 \text{ nm}$. Con estos valores, encontramos que los valores de los coeficientes de absorción y esparcimiento para una capa plana paralela de medio muy pigmentado ($\eta = 10^6 \text{ cells/cm}^2$) de espesor $d = 50 \mu\text{m}$ están dados por

$$\mu_a = \frac{\eta}{d} C_a = 154 \text{ cm}^{-1} \quad \text{y} \quad \mu_s = 162 \text{ cm}^{-1}. \quad (158)$$

Capítulo VII

Absorción y esparcimiento de luz en un modelo de coral

Una vez determinados los valores típicos de los distintos medios que intervienen en nuestro modelo de coral, es posible estudiar la interacción de la luz con el modelo completo. En particular, nos interesa entender la relación que existe entre la absorción de las células simbióticas y las propiedades de esparcimiento del esqueleto de coral. Esto nos ayudará a entender el ambiente de luz en el que vienen las algas y la dinámica de las propiedades de absorción cuando se presentan eventos de blanqueamiento.

VII.1 Modelo del coral

La naturaleza de los corales pétreos se ilustra en las figuras 1 y 32. En las fotografías (a) y (b), se muestra un meandroide mórfico (coral cerebro) con los tentáculos extendidos y retraídos. El esqueleto formado por el animal se muestra en la fotografía 32 (c), y en la 32 (d) se muestra una microfotografía de las algas simbióticas. El tejido del animal es prácticamente transparente y el esqueleto es una estructura blanca, altamente esparcidora. Las algas unicelulares tienen un diámetro de alrededor de $10 \mu\text{m}$ y son las responsables de las propiedades de absorción de la estructura. El tamaño y la forma de la estructura del coral depende de la especie de coral. Ésta sigue la geometría definida por los polipos, que tienden a formar una estructura radial. En una colonia de corales, estas pequeñas estructuras están colocadas en un arreglo más o menos regular o periódico.

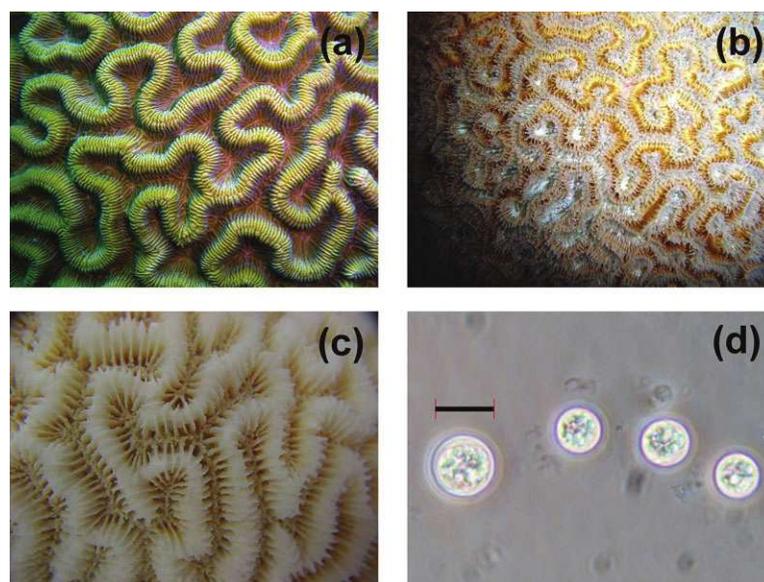


Figura 32. Ilustración de la naturaleza básica de un coral. (a) Coral con los tentáculos retraídos. (b) Coral con los tentáculos extendidos. (c) Esqueleto de coral. (d) Algas simbióticas *S. kawagutii*. La longitud de la marca es $10 \mu\text{m}$.

Para nuestro estudio consideramos un modelo simplificado del coral cuya morfología contiene, en nuestra opinión, las características físicas más importantes del problema. La estructura considerada se muestra en la figura 33. Suponemos que la estructura es invariante a lo largo del eje- y y que es periódica, con periodo T , a lo largo del eje- x . El grosor de la capa de tejido del animal, que contiene las células fotosintéticas, es $d = 50 \mu\text{m}$ y está separado del esqueleto por una capa de agua muy delgada. A menos que lo especifiquemos de otra manera, supondremos los siguientes parámetros para la geometría: $h = 5 \text{ mm}$, $w = 1 \text{ mm}$ y $s = 2 \text{ mm}$. El modelo supone que los tentáculos están retraídos, como normalmente lo están durante el día. Aunque sería deseable estudiar la estructura tridimensional completa, el modelo considerado es apropiado para el estudio, y debería ser útil para investigar tendencias cualitativas en casos más generales.

Al usar este modelo, nuestra meta principal es calcular la fracción de la potencia

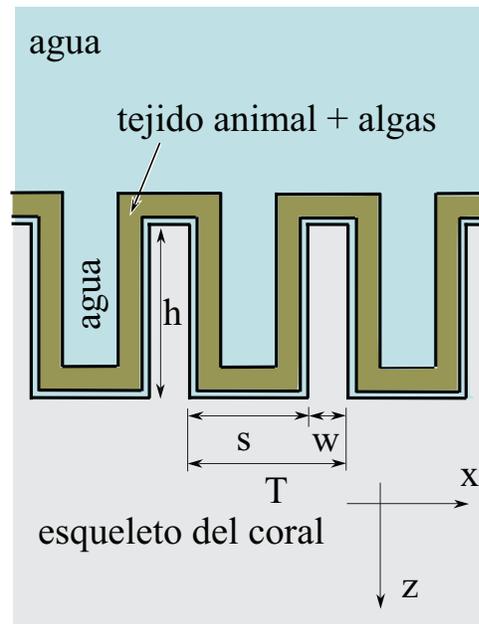


Figura 33. Diagrama esquemático del modelo de coral considerado.

óptica incidente que es absorbida por la capa que consiste del tejido animal con las microalgas. Con esta información, uno puede calcular la fracción de luz absorbida por cada microalga. Debido a la complejidad de la estructura, hemos decidido llevar a cabo nuestro estudio por medio de cálculos tipo Monte Carlo, que ya se describieron en el capítulo III.

Dado que los cálculos se basan en óptica lineal, la absorción por célula es un indicativo del ambiente de luz que “ven” o sienten las microalgas. Antes de presentar resultados, definimos un “factor de reforzamiento”, que provee una indicación de que tan grande es el ambiente de luz en el que están las algas en comparación con el que verían fuera de la estructura calcárea.

VII.2 El factor de reforzamiento

Para abordar esta cuestión, comenzaremos por examinar una región del espacio que contiene partículas que absorben. La región está contenida en un volumen V , que en la dirección de iluminación presenta una sección transversal geométrica C_V . Suponemos que el haz de iluminación es tal que sólo llena la sección transversal C_V con una irradiancia uniforme $I_o = P_o/C_V$, donde P_o representa la potencia incidente. En términos de la fracción de la potencia incidente absorbida por este cuerpo (A), la potencia perdida por absorción se puede escribir como,

$$P_a = AC_V I_o. \quad (159)$$

En consecuencia, la potencia media absorbida por una sola partícula dentro de este volumen es

$$P_a^{(1)} = \frac{P_a}{N} = A \frac{C_v}{N} I_o, \quad (160)$$

donde N es el número de partículas en el volumen.

Por otro lado, la potencia absorbida por una sola partícula iluminada por un haz de irradiancia I_o es

$$P_a^{(0)} = C_a I_o,$$

donde C_a es la sección transversal de absorción de la partícula.

Definimos ahora el factor de reforzamiento de ε como la razón entre $P_a^{(1)}$ y $P_a^{(0)}$. Este factor se puede escribir en la forma

$$\varepsilon = \frac{A}{C_a \eta} \quad (161)$$

donde la densidad de superficie de las partículas $\eta = N/C_V$ está dada por el número de partículas en el volumen dividido por la sección transversal del volumen V en la

dirección de la iluminación. Este factor es una medida de la modificación del ambiente de luz por la estructura en la que la partícula se encuentra inmersa. Con respecto a la luz ambiente fuera de la estructura, el entorno de luz es mayor cuando $\varepsilon > 1$ y se reduce cuando $\varepsilon < 1$. Para estructuras complejas, como las que nos interesan, la absorción fraccional A puede ser calculada con la simulación de Monte Carlo. Como veremos, el esparcimiento juega un papel importante en la modificación del ambiente lumínico.

Para ilustrar estos conceptos, consideramos el ejemplo de una capa plana absorbente de espesor d , un coeficiente de esparcimiento $\mu_s = 0$, y el mismo índice de refracción que el medio en que está embebido. La capa se ilumina desde una dirección que forma un ángulo con θ_o con respecto a la normal a su superficie (ver figura 34). A lo largo de la dirección de iluminación, el espesor de la película es $d/\cos\theta_o$ y la absorción de la capa viene dada por

$$A = 1 - e^{-\mu_a d / \cos\theta_o}. \quad (162)$$

De las ecuaciones (161) y (162), el factor de reforzamiento resultante se puede escribir de la forma

$$\varepsilon = \frac{1 - e^{-\mu_a d / \cos\theta_o}}{\mu_a d / \cos\theta_o}. \quad (163)$$

Vemos que, la absorción aumenta en función del espesor óptico de la muestra $\tau = \mu_a d / \cos\theta_o$ y, en este caso, el factor de reforzamiento $\varepsilon \leq 1$. Ésto es precisamente el efecto paquete que tanto afecta a las estructuras fotosintéticas pues las estructuras muy pigmentadas pierden una gran eficiencia de absorción por unidad de pigmento o unidad absorbente, en este caso por célula.

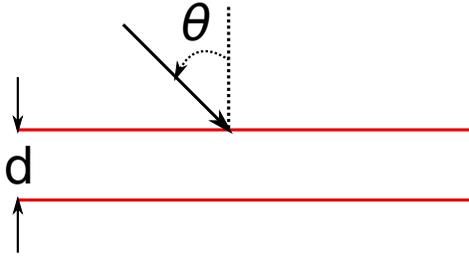


Figura 34. Esquema de la geometría considerada por el factor de reforzamiento.

VII.3 Resultados

Iniciamos esta sección considerando caso particular de una capa de tejido de coral con algas simbióticas. Este caso servirá también como referencia. El espesor de la capa es $d = 50 \mu\text{m}$, y los coeficientes de absorción, esparcimiento y anisotropía son: $\mu_a = 154\text{cm}^{-1}$, $\mu_s = 162\text{cm}^{-1}$ y $g = 0.98$. Llamamos a esta estructura el “modelo de la capa plana” la cual tiene las propiedades ópticas que tendría el tejido de un coral plano bien pigmentado ($\eta = 10^6\text{cells/cm}^2$) (Drew, 1972). Tengamos en cuenta que, aunque μ_a y μ_s son del mismo orden, μ'_s es mucho menor que μ_a porque g tiene un valor cercano a la unidad. Esto significa que, en lo que a absorción se refiere, la capa del tejido animal se comporta como una película homogénea y uno esperaría que las expresiones (162) y (163) fueran válidas en este caso.

Sin embargo, con el objeto de hacer un desarrollo más completo y para probar los resultados del análisis, hemos estudiado este problema por medio de la simulación de Monte Carlo. Para incidencia normal, los resultados indican que el 54% de la luz es absorbida por la capa y que el factor de reforzamiento es $\varepsilon = 0.7$. Como se esperaba, estas cifras coinciden con las predichas por las expresiones (162) y (163). La simulación de Monte Carlo también puede proporcionar un mapa de la absorción en función de la profundidad z en la capa. Esto se muestra en la Figura 35 con la línea discontinua.

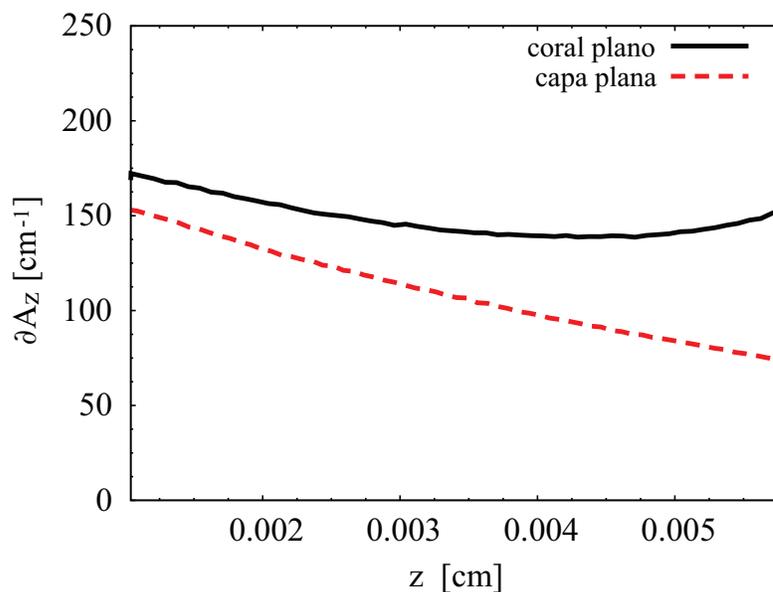


Figura 35. Absorción como función de la profundidad.

Para este caso sencillo, la absorción en función de la profundidad también se puede calcular a través de la derivada de la ecuación (162). Dado que la absorción en cada sitio es proporcional a la irradiación local, esta gráfica ilustra el decaimiento del ambiente lumínico local dentro de la capa. Hay casi el doble de luz en la parte superior de la capa que en la parte inferior. Por lo tanto, visto como una estructura para la colección de la luz, una capa plana bien pigmentada de tejido está afectada por el efecto paquete y los pigmentos pierden eficiencia de absorción de luz, pues el factor ϵ es inferior a la unidad. Una consecuencia biológica muy importante es que a pesar de que una fracción importante de la luz pasa a través de la capa, las algas no estarían iluminadas de manera uniforme.

Ahora consideramos las consecuencias de colocar un esqueleto de coral plano detrás de la capa absorbente. Llamamos a esto el “modelo de coral plano”. Los parámetros de la estructura considerada se resumen en la Tabla IV. Bajo incidencia normal, la absorción por la capa de algas es del 74% y la absorción como función de la profundidad

se muestra como la curva continua de la Figura 35. Vemos que la cantidad de auto sombra o efecto de empaquetamiento ha disminuído y que la absorción total de la capa se ha incrementado. En este caso el factor de reforzamiento es $\varepsilon = 0.96$ y, claramente, esta sería una estructura más eficiente para la colecta de luz.

Vale la pena mencionar en este momento, que los casos que hemos considerado hasta ahora sólo involucran capas planas y se pueden estudiar tanto con el programa original (MCML) como con el modificado (MCML*). Teniendo en cuenta las fluctuaciones estadísticas asociadas con los cálculos de Monte Carlo, la concordancia entre los resultados obtenidos con los dos programas es muy bueno.

Tabla IV. Parámetros empleados para los cálculos con el coral plano.

	μ_a [cm^{-1}]	μ_s [cm^{-1}]	g [-]	d [cm]
agua	0.01	0.01	0.0	0.001
agua+alga	154.0	162.0	0.9	0.005
agua	0.01	0.01	0.0	0.001
esqueleto	0.25	12.5	0.0	1.443

Ahora dirigimos nuestra atención a la estructura mostrada en la figura 33 con $h = 5$ mm, $w = 1$ mm y $s = 2$ mm. A pesar de que utilizamos el mismo valor de $\eta = 10^6$ células/ cm^2 que en los casos anteriores, los valores de los coeficientes de absorción y esparcimiento han cambiado a $\mu_a = 35.5 \text{ cm}^{-1}$ y $\mu_s = 37.8 \text{ cm}^{-1}$. Esto se debe a que la longitud de la capa de tejido animal se ha incrementado. Aparte de esto, los demás parámetros son como en la Tabla IV.

Con esta estructura, encontramos que el 87% de la potencia incidente es absorbida por las algas, lo cual implica que el factor de reforzamiento es $\varepsilon = 1.12$ para este caso. Estos resultados indican que, a pesar de la alta densidad superficial de células

los pigmentos en el tejido de coral no experimentan el efecto paquete sino todo lo contrario, consiguen mejorar su capacidad de absorción pues ϵ es > 1 . Los resultados también indican que, el campo de luz en la capa de tejido animal se ve reforzada en comparación con el campo de luz fuera de la estructura. Esta es una característica notable que proporciona indicios sobre el porqué de la estrecha relación entre las células simbióticas y los corales. Además, los mapas de absorción obtenidos con los cálculos de Monte Carlo indican que el campo de luz es muy homogéneo dentro del tejido animal lo que es muy relevante para el ajuste del aparato fotosintético de las algas simbiotas al ambiente lumínico en el interior del tejido. Un campo lumínico muy variable limita la capacidad de optimizar el ajuste y requiere de mayores costos de mantenimiento de las algas. Para facilitar comparaciones, en el Tabla V se resumen los resultados para los tres tipos de estructuras consideradas. Los números en la tabla ilustran la alta eficiencia del modelo de coral como estructura de recolección de luz.

Tabla V. Resultados de absorción para los modelos estudiados.

	Absorción total	Absorción por alga	Factor de reforzamiento
capa plana	0.54	0.54	0.70
coral plano	0.89	0.74	0.96
coral	0.94	0.87	1.12

Dada la gran variabilidad de las especies de coral, estructuras del esqueleto y propiedades de las algas, es pertinente preguntar qué tan críticos son los parámetros de la geometría elegida para los resultados y cómo estos pueden afectar nuestras conclusiones. Para abordar esta cuestión, hemos explorado la dependencia del factor de reforzamiento con los parámetros geométricos de la estructura y el ángulo de incidencia de la iluminación. Los resultados se muestran en la figura 36. Podemos ver que para la

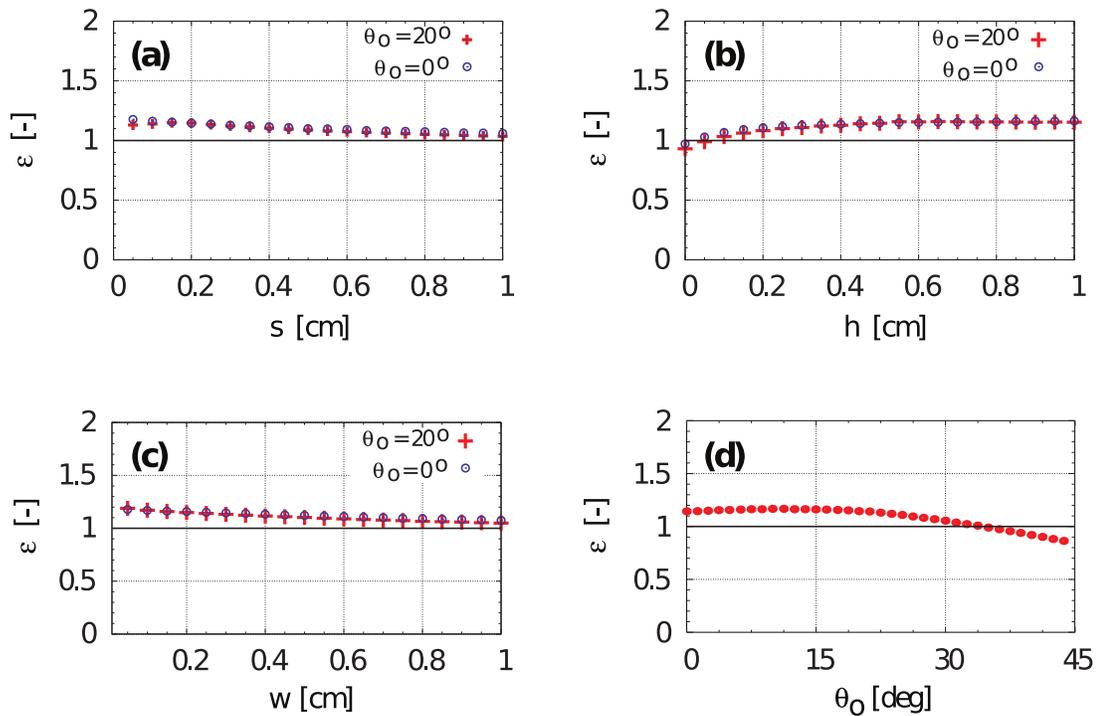


Figura 36. Sensibilidad del factor de reforzamiento a los parámetros de la geometría considerada en la figura 33.

capa de coral bien pigmentada que estamos considerando, los parámetros geométricos (s , h y w) tienen un efecto muy pequeño en el factor de reforzamiento. Para ángulos de incidencia de hasta 25° , los resultados son insensibles al ángulo de incidencia. Si consideramos que la luz del sol es refractada por la interfase aire-agua, el ángulo de incidencia que corresponden a este ángulo será de alrededor de 49° . Sobre la base de estos cálculos podemos decir que para corales muy pigmentados, las propiedades de absorción de la estructura son bastante insensibles a los parámetros geométricos y a las condiciones de iluminación.

En el contexto de blanqueamiento, es importante considerar las consecuencias de perder simbiontes o pigmentación. Con esta motivación en mente, hemos llevado a cabo cálculos de las propiedades ópticas de los corales cuando se reduce el número de células por área proyectada (η). En la Figura 37 se presentan los resultados de la reflectancia

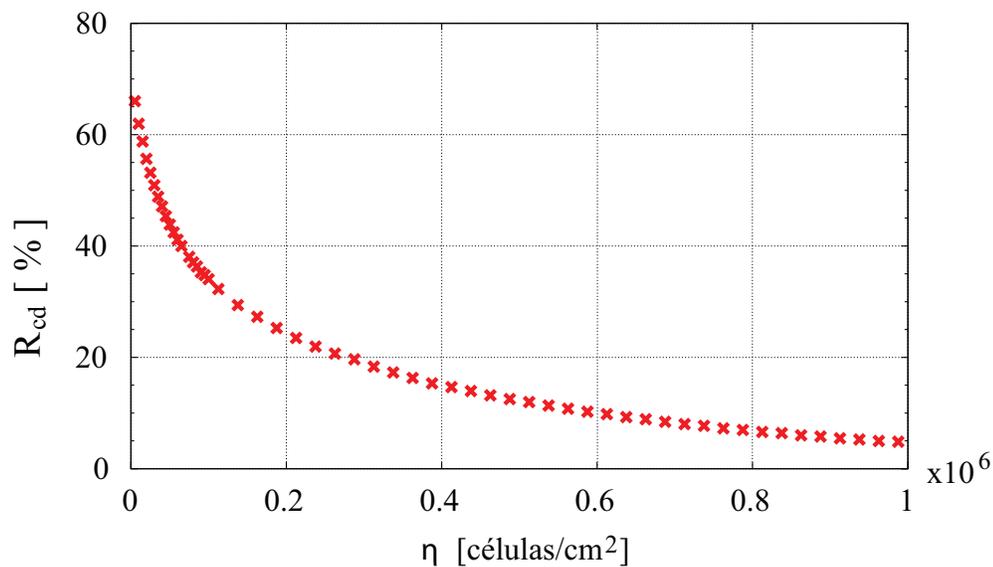


Figura 37. Reflectancia de un coral como función de la densidad superficial de las células.

del coral cuando hay una pérdida de simbioses. Observamos una dependencia no lineal entre la reflectancia y la densidad superficial de las células; la reflectividad aumenta de forma exponencial cuando η se reduce. Esto tiene implicaciones interesantes. Por ejemplo, un coral que ha perdido el 20% de los simbioses como consecuencia de encontrarse bajo estrés apenas se notaría en su color o apariencia.

Los resultados del factor de reforzamiento como función de la densidad de las células se presentan en la figura 38 para los diferentes modelos que estamos considerando. Para el modelo de coral vemos que, cuando el número de células disminuye, aumenta el factor de reforzamiento y que, para valores bajos de η , el reforzamiento puede ser sustancial. Un aumento considerable en el ambiente lumínico puede dar lugar a fotoinhibición y daños permanentes en las células simbióticas. Estos resultados ilustran la gravedad del fenómeno del blanqueamiento, y están en concordancia cualitativa con las observaciones experimentales reportadas por Enríquez *et al.* (2005). También en ese artículo se encontró que el incremento en el factor de absorción de una partícula aislada por encima de un esqueleto plano era de $\varepsilon = 1 + 2R_{cd}$, donde R_{cd} es la reflectancia difusa

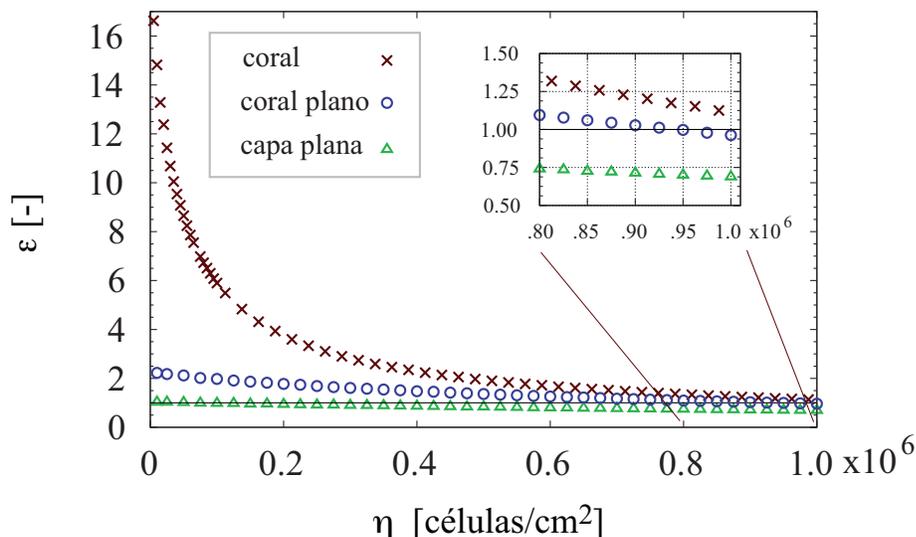


Figura 38. El factor de reforzamiento ϵ como una función del número de células por área proyectada η para las diferentes estructuras.

del esqueleto. Hemos visto que con nuestros parámetros $R_{cd} = 0.61$, lo cual resulta en un factor de reforzamiento de $\epsilon = 2.22$. Este valor de ϵ concuerda con el resultado para el modelo plano de coral que se muestra en la figura 38 en el límite de $\eta \rightarrow 0$.

Todos estos resultados ilustran la importancia del esqueleto en la configuración del ambiente de luz en que los simbioses están inmersos y también en la reducción de la autosombra de los pigmentos y la mejora de su eficiencia de absorción en el tejido intacto del coral. Esta estrategia de optimización de captación de energía solar funciona bien para los corales sanos, pero es contraproducente cuando los corales se ven afectados por cualquier estrés ambiental y absorben luz en exceso. Esta situación subóptima induce en el coral una respuesta encaminada a reducir su capacidad de coleccionar luz para contrarrestar este exceso de absorción, lo que al final puede resultar en blanqueamiento.

En estos casos también es pertinente preguntarse sobre posibles estrategias para mejorar esta situación. Se sabe, por ejemplo, que algunos corales son capaces de añadir pigmentación a las estructuras esqueléticas calcáreas agregando compuestos orgánicos en su interior. También los esqueletos pueden llegar a ser menos reflejantes gracias a la

presencia de comunidades endolíticas de microorganismos fototróficos. Para explorar esta situación, en la figura 39 se presentan los resultados del factor de reforzamiento en función del coeficiente de absorción del esqueleto μ_a . La figura 39 (a) corresponde a un coral muy pigmentado ($\eta = 10^6$ células/cm²), mientras que figura 39 (b) es para un coral parcialmente blanqueado que tiene una densidad superficial de simbioses de un orden de magnitud menor $\eta = 10^5$ células/cm². También presentamos el factor de reforzamiento del modelo de coral plano y, como referencia, se muestra la reflectividad del esqueleto en (a) como la curva de trazos y puntos. Las líneas verticales finas indican una situación normal, en la que $\mu_a = 0.5 \text{ cm}^{-1}$. Observamos que para un coral bien pigmentado o “saludable”, la absorción del esqueleto puede modificar el ambiente de luz sólo un poco, pues el rango de variación es de aproximadamente un 25%. Por otra parte, para un coral parcialmente blanqueado, la absorción del esqueleto puede modular mucho más el factor de reforzamiento. Notemos sin embargo que, aunque el esqueleto sea muy absorbente, el factor de reforzamiento sólo se reduce a un valor de alrededor de $\varepsilon = 2$, lo que podría ser insuficiente para eliminar el estrés de las algas por las condiciones de alta luz pero sí podría ser fundamental para facilitar la recolonización por las algas del tejido no pigmentado, una vez que el estrés ambiental haya terminado..

Con los resultados presentados, es posible visualizar los procesos dinámicos de blanqueamiento. Supongamos que, por alguna razón (como altas temperaturas), un coral comienza a perder simbioses. Al principio, la situación no necesariamente es estresante y los simbioses pueden adaptarse a un ambiente de luz diferente. Sin embargo, si el intento de reducir la dosis de luz del coral al disminuir su pigmentación es infructuoso, pues los simbioses que se mantienen en el tejido reciben cada vez la misma o mayor dosis de luz al disminuir la pigmentación. Por tanto, a partir de cierto momento la situación se deteriorará a una tasa cada vez mayor (ver la curva que corresponde a los

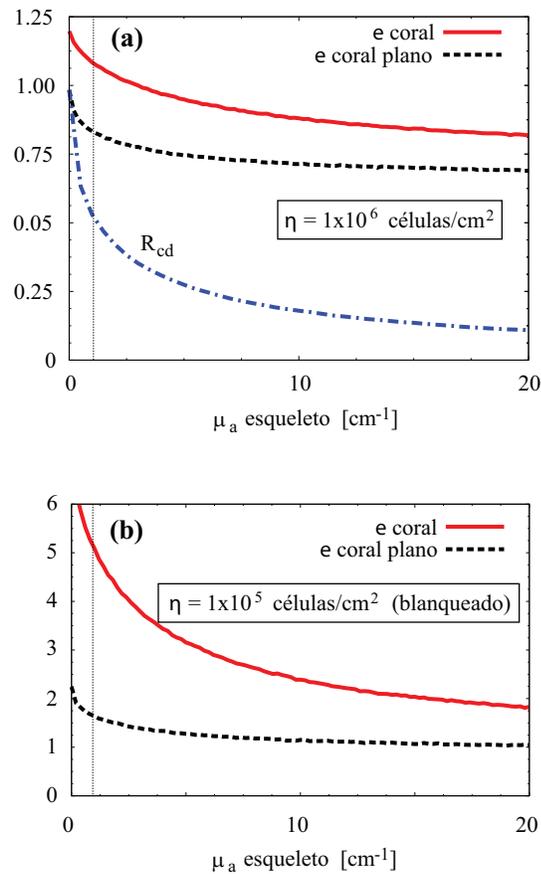


Figura 39. Factor de reforzamiento como una función del coeficiente de absorción del esqueleto μ_a . (a) Coral bien pigmentado con $\eta = 10^6$ células/cm² y, (b) coral blanqueado con $\eta = 10^5$ células/cm². La curva continua corresponde al modelo de coral y la curva punteada al modelo del coral plano. La curva de trazos y puntos en (a) es la reflectancia del esqueleto plano como una función de μ_a . La línea delgada vertical corresponde a $\mu_a = 0.5\text{cm}^{-1}$.

corales en la figura 38). A menos que la causa original del estrés sea eliminada, esta situación inestable terminará irremediamente con un coral blanqueado.

Capítulo VIII

Resumen y conclusiones

El trabajo realizado en esta tesis se puede dividir en tres partes. La primera involucra el diseño y la implementación de arreglos experimentales para estimar las propiedades ópticas de los medios involucrados en nuestro modelo de coral. Se desarrollaron métodos originales para caracterizar ópticamente las algas simbióticas y los esqueletos de coral. En la segunda parte se desarrollaron programas para la realización de cálculos tipo Monte Carlo de la propagación y absorción de luz en medios con heterogeneidades ópticas, y geometrías que permiten tener variaciones de altura. En la tercera parte se utilizaron los programas desarrollados para estudiar la interacción de la luz con el modelo de coral simplificado.

Los arreglos experimentales desarrollados para caracterizar las células microscópicas y el esqueleto del coral son bastante generales y pueden ser utilizados en la caracterización de partículas pequeñas y otros medios heterogéneos. Para diseñar estos arreglos fue necesario hacer una revisión de la teoría de las esferas integradoras y un análisis de la sensibilidad de los diferentes métodos a posibles errores experimentales. Este estudio es original y nos permitió implementar un arreglo para la estimación confiable de la reflectancia y transmitancia difusa de medio heterogéneos bajo iluminación direccional.

Para el caso del esqueleto, se estimaron los valores de reflectancia (R_{cd}) y transmitancia (T_{cd}) difusas de una rebanada de material. Sin embargo, para determinar los coeficientes de esparcimiento (μ'_s) y absorción (μ_a), fue necesario resolver un problema inverso. Tratando el problema como un problema de optimización y utilizando el al-

goritmo desarrollado por Nelder y Mead (Nelder y Mead, 1965) llegamos a resultados estables para los coeficiente ópticos μ'_s y μ_a , partiendo de R_{cd} y T_{cd} .

Para estudiar la interacción de la luz con la estructura del modelo propuesto, desarrollamos programas para realizar simulaciones tipo Monte Carlo del problema. Los programas que otros autores han puesto disponibles en la red permiten realizar cálculos con medios que consisten de capas planas y paralelas. Sin embargo, para estudiar nuestro modelo de coral fue necesario modificar el programa MCML (Wang y Jacques, 1992) y permitir variaciones de altura. El programa supone que hay una dirección en la que la estructura no varía, pero en otros aspectos es bastante general. Permite variar el ángulo de incidencia y utilizar diferentes funciones de fase para los medios involucrados (el programa original utiliza la función de fase de Henyey-Greenstein).

Con la simulación de Monte Carlo fue posible estudiar la interacción de la luz en el modelo de coral. De especial interés son las consecuencias del esparcimiento múltiple en el ambiente lumínico en el que viven las algas simbióticas. Los cálculos permiten estimar la fracción de luz absorbida por la capa que contiene a las algas fotosintéticas y, con esta información, es posible calcular la fracción de luz absorbida por cada microalga. Suponiendo que se trata de un problema lineal, esto da información del sobre el ambiente lumínico relativo en el que viven las microalgas y su modificación debido a la estructura del coral.

Para cuantificar la modificación del ambiente lumínico por la estructura se definió un parámetro (ε), que llamamos el factor de amplificación o reforzamiento. Para una estructura dada, este parámetro permite determinar si el ambiente lumínico en el que viven las algas es mayor ($\varepsilon > 1$) o menor ($\varepsilon < 1$) que el externo.

Los resultados muestran que en un coral bien pigmentado, el campo local en las cavidades del esqueleto es ligeramente mayor que aquel que verían las microalgas fuera

de la estructura, lo cual puede resultar atractivo para las algas fotosintéticas. Sin embargo, si el coral pierde pigmentación, el ambiente local de luz puede ser mucho mayor que el externo. Esto tiene consecuencias adversas que podrían llegar a ser catastróficas; la intensificación del ambiente lumínico puede, por ejemplo, producir daños permanentes en las células fotosintéticas. Con esta información es posible hacer modelos de la dinámica del fenómeno de blanqueamiento de corales.

Por otro lado, nuestro estudio muestra que la introducción de propiedades de esparcimiento en una muestra puede intensificar el ambiente lumínico local. Esto sugiere el uso de estrategias basadas en esparcimiento luz en el diseño de colectores solares.

Referencias

- Boas, D. A. (1996). *Diffuse Photon Probes of Structural and Dynamical Properties of Turbid Media: Theory and Biomedical Applications*. Tesis de Doctorado, University of Pennsylvania, Philadelphia, PA, 1–244.
- Brown, B. E. (1997). Coral bleaching: causes and consequences. *Coral Reefs*, **16**: S129–S138.
- Case, K. M. y Zweifel, P. F. (1967). *Wave Propagation and Scattering in Random Media*. Oxford University Press, Oxford, UK, 1–573.
- Chandrasekhar, S. (1947). The transfer of radiation in stellar atmospheres. *Bull. Amer. Math. Soc.*, **53**: 641–654.
- Chandrasekhar, S. (1960). *Radiative Transfer*. Dover Publications, Inc., 31 East 2nd Street, Mineola, NY, 11501, 1, primero edición.
- Clare, J. F. (1998). Comparison of four analytic methods for the calculation of irradiance in integrating spheres. *J. Opt. Soc. Am. A*, **15**(12): 3086–3096.
- Davison, B. (1958). *Neutron Transport Theory*. Oxford University Press, London, UK, 1–250.
- Drew, E. A. (1972). The biology and physiology of alga-invertebrates symbioses. II. The density of symbiotic algal cells in a number of hermatypic hard corals and alcyonarians from various depths. *J. Exp. Mar. Biol. Ecol.*, **9**: 71–75.
- Enríquez, S., Mendez, E. R., y Iglesias-Prieto, R. (2005). Multiple scattering on coral skeletons enhances light absorption by symbiotic algae. *Limnology Oceanography*, **50**: 1025–1032.
- Friden, B. R. (1983). *Probability, Statistical Optics, and Data Testing*. Springer-Verlag.
- Goebel, D. G. (1967). Generalized integrating-sphere theory. *Appl. Opt.*, **6**(1): 125–128.
- Goreau, T. y Goreau, N. I. (1959). The physiology of skeleton formation in corals. II. Calcium deposition by hermatypic corals under various conditions in the reef. *Biol. Bull.*, **117**: 239–250.
- Henvey, L. y Greenstein, J. L. (1941). Diffuse Radiation in the Galaxy. *Astrophys. J.*, **93**: 70–83.
- Hisdal, B. J. (1965). Reflectance of perfect diffuse and specular samples in the integrating sphere. *J. Opt. Soc. Am.*, **55**(9): 1122–1125.

- Hoegh-Guldberg, O. (1999). Climate change, coral bleaching and the future of the worlds coral reefs. *Mar. Freshwat. Res.*, **50**: 839– 866.
- Hoegh-Guldberg, O., Mumby, P. J., Hooten, A. J., Steneck, R. S., Greenfield, P., Gomez, E., Harvell, C. D., Sale, P. F., Edwards, A. J., Caldeira, K., Knowlton, N., Eakin, C. M., Iglesias-Prieto, R., Muthiga, N., Bradbury, R. H., Dubi, A., y Hatziolos, M. E. (2007). Climate change, coral bleaching and the future of the worlds coral reefs. *Science*, **318**: 1737– 1742.
- Hull, E. L. (1986). *Spectroscopy and Characterization of Turbid Media with the Diffusion and P3 Approximation*. Tesis de Doctorado, University of Rochester, New York, 1–219.
- Iglesias-Prieto, R., Matta, J. L., Robins, W. A., y Trench, R. K. (1992). Photosynthetic response to elevated temperature in the symbiotic dinoflagellate *Symbiodinium microadriaticum* in culture. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **89**: 10302– 10305.
- Ishimaru, A. (1978). *Wave propagation and Scattering in Random Media*. Academic Press. Primera edición. New York.
- Jacquez, J. A. y Kuppenheim, H. F. (1955). Theory of the integrating sphere. *J. Opt. Soc. Am.*, **45**(6): 460–466.
- Knuth, D. E. (1997). *The art of Computer Programming*. Addison-Wesley, Reading, Mass, tercera edición.
- Kortum, G. (1969). *Reflectance spectroscopy. Principles, Methods, Applications*. Springer-Verlag, Plenum, New York.
- Lesser, M. P. (1996). Elevated temperatures and ultraviolet radiation cause oxidative stress and inhibit photosynthesis in symbiotic dinoflagellates. *Limnol. & Oceanogr.*, **41**: 271– 283.
- Ligon, D. A., Chen, T. W., y Gillespie, J. B. (1996). Determination of aerosol parameters from light-scattering data using an inverse monte carlo technique. *Appl. Opt.*, **35**(21): 4297–4303.
- Marsaglia, E. y Zaman, A. (1993). The Kiss generator. Reporte técnico, Technical Report, Department of Statistics, Florida State University,.
- Metropolis, N. y Ulam, S. (1949). The Monte Carlo method. *J. Amer. statistical assoc.*, **44**(247): 335– 341.
- Moon, P. (1940). On interreflections. *J. Opt. Soc. Am.*, **30**(5): 195–200.
- Muscatine, L. y Weis, V. (1992). *Productivity of zooxanthellae and biogeochemical cycles in Primary productivity and biogeochemical cycles in the sea*. Plenum Press.

- Nelder, J. A. y Mead, R. (1965). A simplex method for function minimization. *Computer Journal*, **7**(247): 308–313.
- Palmer, G. M., Zhu, C., Breslin, T. M., Xu, F., Gilchrist, K. W., y Ramanujam, N. (2006). Monte carlo-based inverse model for calculating tissue optical properties. part ii: Application to breast cancer diagnosis. *Appl. Opt.*, **45**(5): 1072–1078.
- Pickering, J. W., Moes, C. J. M., Sterenborg, H. J. C. M., Prahl, S. A., y van Gemert, M. J. C. (1992). Two integrating spheres with an intervening scattering sample. *J. Opt. Soc. Am. A*, **9**(4): 621–631.
- Pickering, J. W., Prahl, S. A., van Wieringen, N., Beek, J. F., Sterenborg, H. J. C. M., y van Gemert, M. J. C. (1993). Double-integrating-sphere system for measuring the optical properties of tissue. *Appl. Opt.*, **32**(4): 399–410.
- Prahl, S. A., van Gemert, M. J. C., y Welch, A. J. (1993). Determining the optical properties of turbid media by using the adding-doubling method. *Appl. Opt.*, **32**: 559–568.
- Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., y Vetterling, W. T. (1986). *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, New York, segundo edición.
- Ramaley, J. F. (1900). Buffon’s Noodle Problem. *Electrotech. Z.*, **21**: 595–597.
- Schuster, A. (1905). Radiation through a foggy atmosphere. *Astrophys J.*, **21**: 1–22.
- Spanier, J. y Gelbard, E. M. (1981). *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. John Wiley, New York.
- Stanley, G. D. (2003). The evolution of modern corals and their early history. *Earth-Science Reviews*, **60**: 195–225.
- Star, W. M., Marijnissen, P. A., y VanGemert, M. J. C. (1988). Light dosimetry in optical phantoms and in tissues: I. Multiple flux and transport theory. *Phys. Med. Biol.*, **33**: 437–454.
- Tardy, H. L. (1991). Matrix method for integrating-sphere calculations. *J. Opt. Soc. Am. A*, **8**(9): 1411–1418.
- Taylor, A. H. (1920). The measurement of diffuse reflection factors and a new absolute reflectometer. *J. Opt. Soc. Am.*, **4**(1): 9–9.
- Taylor, A. H. (1935). Errors in reflectometry. *J. Opt. Soc. Am.*, **25**(2): 51–52.
- Taylor, J. R. (1997). *An introduction to Error Analysis. The study of uncertainties in physical measurements*. University Science Books, segundo edición.

- Ulbricht, R. (1900). Die Bestimmung der mittleren raumlichen Lichtintensitat durch nur eine Messung. *Electrotech. Z.*, **21**: 595–597.
- VandeHulst, H. (1981). *Light scattering by small particles*. Dover publications. Segunda edición. New York.
- Wang, L. y Jacques, S. L. (1992). Monte Carlo Modeling of light Transport in Multi-Layered Tissues in Standard C. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, **47**: 141–150.
- Wang, L. y Jacques, S. L. (1993). MCML: Monte Carlo software package, <http://omlc.orgi.edu/software/mc/index.html>.
- Wang, L., Jacques, S., y Zheng, L. (1995). MCML-Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, **47**: 130– 143.
- Warner, M. E., Fitt, W. K., y Schmidt, G. W. (1999). Damage to photosystem II in symbiotic dinoflagellates: A determinant of coral bleaching. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **96**: 8007– 8012.
- Yaroslavsky, I. V., Yaroslavsky, A. N., Goldbach, T., y Schwarzmaier, H.-J. (1996). Inverse hybrid technique for determining the optical properties of turbid media from integrating-sphere measurements. *Appl. Opt.*, **35**: 6797–6809.

Índice

- Absorción, 23, 88
- Aguja de Buffon, 19
- Células por área proyectada (η), 82
- Constantes esfera, 57
 - b_1 , 60
 - b_2 , 58, 60
- Esferas integradoras, 43
- Espectrofotometro, 67, 89
- Excitancia radiativa, 9
- Factor de anisotropía, 22, 85
- Fibra óptica, 67
- Fluencia, 8
- Flujo, 23, 42
- Función de densidad de prob.
 - Desplazamientos, 28
 - Distribución uniforme, 25
 - Función de fase, 29
- Función de fase, 85
 - Henye-Greenstein, 29, 87
- Hematocitómetro, 92
- Iluminación
 - Difusa, 9, 48
 - Directa, 8, 50
- Intensidad radiativa, 10
- Irradiancia, 8
- Lugol, 92
- Método
 - Monte Carlo, 19
 - Rechazo, 31
 - Transformación inversa, 26
- MANIAC, 19
- MCML, 23
- Números aleatorios, 26
 - Distribución uniforme, 26
 - Generador, 26
 - pseudo-aleatorios, 26
- Potencia, 7
- Radiancia, 10
- Reflectancia, 23, 88
 - Difusa, 50, 59, 61
 - Especular, 51
- Reflexión, 42

Sección transversal

absorción, 11, 80

esparcimiento, 11, 80

extinción, 11, 80

Transmitancia, 23, 52, 88

Variables aleatorias, 26