



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

**“DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA PARA LA
CARACTERIZACIÓN DE LOS FENÓMENOS DE TRANSPORTE
RADIATIVO EN UN CULTIVO DE MICROALGAS”**

Tesis que presenta

I.Q. Luis Angel Castillo Cruz

Para obtener el grado de

Maestro en Ciencias

(Ingeniería Química)

Asesor

Dr. Hugo Joaquín Ávila Paredes

Co-asesor

Dr. Patricio Javier Valades Pelayo

Ciudad de México, agosto 28, 2020.

AGRADECIMIENTOS

Primeramente, deseo expresar mi más profundo agradecimiento al **Dr. Patricio Javier Valades Pelayo** y al **Dr. Hugo Joaquín Ávila Paredes**, quienes fungieron como asesores del proyecto de investigación que se reporta en esta tesis, muchas gracias por brindarme su tiempo, apoyo y conocimiento en cada etapa del proyecto. Ambos son una gran inspiración para mí. **A los sinodales** que me apoyaron con la revisión y crítica final del proyecto, muchas gracias por sus comentarios y consejos para poder mejorar mi trabajo.

A mi madre, Hortencia Cruz Monter, quien me ha brindado su amor incondicional y apoyo en cada una de mis metas, gracias por alentarme a ser mejor cada día y enseñarme a levantarme de los fracasos y que con honestidad y rectitud se puede llegar más lejos. **A mi padre, Juan Castillo Popoca[†]**, quien me guía en espíritu y me enseñó que los triunfos siempre son compartidos, espero estés orgulloso de mí.

A mi hermanos, Ivonne Castillo Cruz y Juan Castillo Cruz, quienes siempre me apoyan y me animan en mis malos momentos, cada uno es una gran fuente de inspiración para mí, muchas gracias por estar conmigo y compartir este nuevo logro.

A mis compañeros de generación, Emily Moreno, Lissete Samarti, Hernán Cortés, Erick Loza, David Zamora y Alejandro Ortega, muchas gracias por su amistad y apoyo, sin ustedes no hubiera disfrutado tanto esta experiencia.

A mis dos grandes colegas y amigos, Victoria Tello Hernández y Edtson Emilio Herrera Valencia, quienes me motivaron a entrar al posgrado de la UAM-I y creyeron siempre en mí, muchas gracias por su motivación y genuina amistad.

Finalmente, quiero agradecer a la **Universidad Autónoma Metropolitana** por permitirme formar parte de esta gran casa de estudios, es un gran honor para mí ser parte de su comunidad, así como al **Conacyt** por brindarme el apoyo económico necesario para poder cumplir un meta más en mi vida profesional. Investigación realizada gracias al Programa **UNAM-PAPIIT** proyecto **TA100720**.

RESUMEN

El presente estudio se centra en describir el efecto de los principales fenómenos de transporte radiativo en fotobiorreactores. Se emplea una nueva metodología experimental diseñada para la estimación independiente y rápida de las propiedades ópticas espectrales del cultivo de microalgas en suspensión. Se toma como ejemplo *Chlorella vulgaris* UTEX 2714, y se estima: coeficiente de extinción (β), albedo (ω) y el parámetro de asimetría (g) de la función fase (Φ). Estos parámetros definen la solución a la ecuación de transporte de radiación, y son fundamentales para poder caracterizar el efecto de las microalgas en el transporte radiativo dentro de cualquier fotobiorreactor.

Se determinó para *Chlorella vulgaris* UTEX 2714, el coeficiente de extinción, albedo y el parámetro de asimetría (g) de manera espectral, a diferentes concentraciones de microalgas en suspensión. Conforme a los resultados obtenidos se concluye que estos son independientes de la concentración de biomasa, pero fuertemente dependientes de la longitud de onda.

Tanto el coeficiente de extinción como el albedo presentan comportamientos espectrales comparables cualitativamente a resultados reportados previamente en la literatura. P.ej., el coeficiente de extinción presenta variaciones moderadas dentro del rango visible, alrededor de $\pm 20\%$ con respecto al valor medio, con un máximo en 525 [nm] y decreciendo linealmente hasta alcanzar un valor mínimo a los 650 [nm]; el albedo por su parte presenta la absorción más alta (albedo mínimo) alrededor de los 440 [nm] y otro mínimo local a 625 [nm], con un valor medio en el rango visible de 0.6.

Por último, el estudio sugiere que la función de fase de *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 puede ser descrita utilizando un modelo de Henyey-Greenstein con un factor de asimetría (g) medio (en el rango visible) de 0.9; esto debido a que la dependencia espectral de (g) es mínima, salvo en los extremos del rango visible (i.e., longitudes de onda menores a 450 [nm] o mayores a 650 [nm]), en donde aparentemente decrece. Este comportamiento en los extremos debería validarse con una fuente que emita más energía en el rango antes mencionado. A pesar de que los datos espectrales disponibles en la literatura para la función de fase de microalgas son escasos, se ha reportado anteriormente que la dispersión de microalgas es principalmente hacia adelante para partículas de este tamaño, en luz visible, lo que era de esperarse en partículas de tamaño similar.

ABSTRACT

The present study focuses on describing the effect of the main phenomena of radiative transport in photobioreactors. A new experimental methodology designed for the independent and fast estimation of the spectral optical properties of the suspension microalgae culture is used. Taking *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 as an example, and it is estimated: extinction coefficient (β), albedo (ω) and the asymmetry parameter (g) of phase function (Φ). These parameters define the solution to the radiation transport equation, and are essential to characterize the effect of microalgae on radiative transport within any photobioreactor.

For *Chlorella vulgaris* UTEX 2714, the extinction coefficient, albedo and the asymmetry parameter (g) were determined spectrally, at different concentrations of the microalgae in suspension. According to the results obtained, it is concluded that these are independent of the biomass concentration, but strongly dependent on the wavelength.

Both the extinction coefficient and the albedo present spectral behaviour comparable qualitatively to results previously reported in the literature. For example, the extinction coefficient presents moderate variations within the visible range, around $\pm 20\%$ with respect to the average value, with a maximum at 525 [nm] and decreasing linearly until reaching a minimum value at 650 [nm]; the albedo for its part presents the highest absorption (minimum albedo) around 440 [nm] and another local minimum at 625 [nm], with an average value in the visible range of 0.6.

Finally, the study suggests that the phase function of *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 can be described using a Henyey-Greenstein model with an average asymmetry factor (g) (in the visible range) of 0.9; because of the spectral dependence of (g) is minimal, except at the extremes of the visible range (i.e., wavelengths shorter than 450 [nm] or greater than 650 [nm]), where it apparently decreases. This extreme behaviour should be validated with a source that emits more energy in the aforementioned range. Although the spectral data available in the literature for the phase function of microalgae are scarce, it has been previously reported that the dispersion of microalgae is mainly forward for particles of this size, in visible light, the order what was to be expected in particles of similar size.

CONTENIDO.

1. INTRODUCCIÓN.....	1
2. ANTECEDENTES	3
2.1. Microalgas	3
2.2. <i>Chlorella vulgaris</i>	4
2.3. Pigmentos absorbedores de luz	5
2.4. Fotosíntesis	6
2.4.1. Fase luminosa.....	7
2.4.2. Fase oscura	8
2.5. Sistemas de cultivo de microalgas	9
2.5.1. Sistemas de cultivos abiertos	9
2.5.2. Sistemas de cultivos cerrados (FBRs).....	10
2.6. Principales factores para el diseño de fotobiorreactores.....	13
2.6.1. Suministro de luz.....	13
2.6.2. Mezclado	14
2.6.3. Transferencia de masa.....	14
2.6.4. Temperatura	15
2.6.5. pH.....	16
2.7. Modelado de la relación entre la intensidad de luz y la fotosíntesis del cultivo de microalgas.....	16
2.7.1. Modelo tipo I que utilizan la intensidad de luz incidente	18
2.7.2. Modelo tipo II.....	19
2.7.3. Modelo tipo III	20
2.8. Transferencia de radiación en medios participativos.....	22
2.8.1. Atenuación por absorción y dispersión	23
2.8.2. Absorción	23
2.8.3. Dispersión.....	24
2.8.4. Atenuación total	24
2.8.5. Aumento por emisión y dispersión.....	24
2.8.6. Emisión.....	24
2.8.7. Dispersión hacia dentro (in - scattering)	25

2.9. Modelado de transferencia de radiación en fotobiorreactores	26
2.9.1. Transferencia de radiación a través de microorganismos en suspensión	27
2.9.2. Características radiativas de microalgas	29
2.9.3. Investigaciones previas (determinación experimental de propiedades ópticas en microalgas)	31
3. JUSTIFICACIÓN, HIPÓTESIS Y OBJETIVOS.....	35
3.1. Justificación	35
3.2. Hipótesis	35
3.3. Objetivos.....	35
3.3.1. Objetivo general.	35
3.3.2. Objetivos particulares.....	35
4. MATERIALES Y MÉTODOS.....	36
4.1. Inóculo.	36
4.2. Medio de cultivo.	37
4.3. Técnicas analíticas	38
4.3.1. Concentración de biomasa mediante peso seco.	38
4.3.2. Concentración de biomasa mediante conteo celular.	38
4.4. Metodología para la determinación de propiedades ópticas de <i>Chlorella vulgaris</i> UTEX 2714.....	39
4.4.1. Sistema experimental para determinación del coeficiente de extinción (β).....	39
4.4.2. Determinación experimental del coeficiente de extinción (β)	40
4.4.3. Sistema experimental para determinación de albedo (ω) y parámetro de asimetría (g)	42
4.4.4. Definición del porcentaje de energía dispersada (φ).....	43
4.4.5. Determinación del albedo promedio y espectral a partir del porcentaje de energía dispersada (φ)	46
4.4.6. Función fase (Φ) de Henyey-Greenstein.....	47
4.4.7. Determinación experimental del parámetro de asimetría (g) de la función de fase (Φ).....	48
4.5. Simulación y desarrollo	51
4.5.1. Método de Monte Carlo Ray Trace.....	51
4.5.2. Fundamento teórico del método de Monte Carlo Ray Trace.	53

4.5.3. Expansión de perturbación de la RTE en (ω)	53
4.5.4. Función de Green de la RTE.....	56
4.5.5. Simulación de la RTE por el método de Monte Carlo Ray Trace aplicado al sistema experimental de propiedades ópticas.....	60
5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	61
5.1. Efecto de la concentración de la microalga <i>Chlorella vulgaris</i> UTEX 2714 en la cantidad de intensidad radiativa transmitida.....	61
5.2. Coeficiente de extinción específico promedio del cultivo de microalga <i>Chlorella vulgaris</i> UTEX 2714.....	62
5.3. Coeficiente de extinción específico espectral del cultivo de microalga <i>Chlorella vulgaris</i> UTEX 2714.....	63
5.4. Coeficiente de extinción específico promedio estimado en sistemas de diferentes geometrías (Cilíndrica y esférica).....	65
5.5. Estimación del albedo promedio a partir de simulaciones computacionales por el método de MCRT	66
5.6. Albedo promedio del cultivo de microalga <i>Chlorella vulgaris</i> UTEX 2714.....	67
5.7. Albedo espectral del cultivo de microalga <i>Chlorella vulgaris</i> UTEX 2714.....	68
5.8. Variabilidad angular del porcentaje de energía dispersada por el cultivo de microalgas <i>Chlorella vulgaris</i> en función del parámetro de asimetría $\langle g \rangle$	70
5.9. Parámetro de asimetría espectral (g_λ) de la microalga <i>Chlorella vulgaris</i> UTEX 2714.	72
6. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO.....	73
7. REFERENCIAS.	76
Apéndice A. Curva patrón para determinación de concentración de la microalga <i>Chlorella vulgaris</i> UTEX 2714 en medio Bayfolan (1.05 g/mL).....	79
Apéndice B. Simulaciones de energía transmitida y dispersada a bajas concentraciones de biomasa, empleando el método de MCRT para la estimación del albedo promedio.	80
Apéndice C. Simulaciones de energía transmitida y dispersada, empleando el método de MCRT para la estimación del albedo espectral.	81
Apéndice D. Códigos de programación del método de MCRT en Matlab.....	82

NOMENCLATURA

A	Superficie, [m ²]
C_b	Concentración de biomasa, [g/m ³]
E	Energía radiativa, [W]
G	Irradiancia esférica, [W/m ²]
I_b	Intensidad de cuerpo negro, (Función de Planck)
I	Intensidad de radiación, [W/m ² *sr]
s	Distancia entre dos zonas o dos puntos de una superficie confinada, [m]
\hat{s}	Vector unitario en una dirección dada [-]
j	Coefficiente de emisión, [-]
V	Volumen, [m ³]
\hat{n}	Vector normal, [-]
\hat{q}	Flux radiativo, [W*m ²]
l	Longitud, [m]
\hat{r}	Vector posición, [m]

Letras griegas

α	Absortividad, [-]
β	Coefficiente de extinción, [m ⁻¹]
β^*	Coefficiente de extinción específico, [m ² /g]
ω	Albedo, [-]
κ	Coefficiente de absorción, [m ⁻¹]
λ	Longitud de onda, [nm]
Ω	Ángulo sólido, [sr]
π	Constante pi, [-]
σ	Coefficiente de dispersión, [m ⁻¹]
τ	Espesor óptico, [-]
Φ	Función fase de dispersión, [sr ⁻¹]

Subíndices

<i>A</i>	Absorción
<i>b</i>	Cuerpo negro
<i>c</i>	Colimado
<i>d</i>	Difuso
<i>D</i>	Dispersada
<i>em</i>	Emisión
<i>i</i>	Contador
<i>in</i>	Entrada
<i>out</i>	Salida
<i>T</i>	Transmitida
λ	Referencia a longitud de onda
0	Concentración cero

1. INTRODUCCIÓN

La creciente demanda de energía ha generado preocupaciones sobre el agotamiento de los combustibles fósiles, así como las emisiones antropogénicas de dióxido de carbono (CO_2) que han contribuido al cambio climático global. Con el fin de reducir el consumo de combustibles fósiles y las emisiones de CO_2 asociadas, se ha prestado mucha atención a fuentes de energía renovables y sostenibles, como la eólica, la mareomotriz, la solar y los biocombustibles. En particular, los biocombustibles derivados de microalgas se han considerado como una de las fuentes de energía renovable más prometedoras, debido a los rasgos únicos de las microalgas [1].

El cultivo de microalgas consiste en proporcionar CO_2 , luz solar y nutrientes a especies seleccionadas de microalgas, las cuales son cultivadas en fotobiorreactores. Además, la biomasa generada puede ser utilizada para producir combustibles tales como el metano e hidrógeno a través de la digestión anaerobia y fermentación oscura, respectivamente; o combustibles líquidos como el etanol y biodiesel, dependiendo de las especies y metabolitos acumulados (carbohidratos o lípidos) [2].

Uno de los principales factores para el cultivo de microalgas es la fuente de energía (solar o artificial) que impulsa la actividad metabólica de los microorganismos fotosintéticos (microalgas). A medida que la luz penetra en el fotobiorreactor, es absorbida y dispersada por los microorganismos. Por lo tanto, es importante analizar la transferencia de radiación en los fotobiorreactores que es gobernada por la ecuación de transferencia de radiación (Radiative Transfer Equation, RTE). Este último es un balance de la energía radiativa que se propaga a lo largo de una dirección particular (\hat{s}). Los coeficientes de absorción y dispersión de las microalgas junto con la función fase son parámetros importantes y necesarios para resolver y simular la RTE en fotobiorreactores. El correcto análisis de estos parámetros puede llevar a mejorar el diseño, escalamiento, y control del cultivo de microalgas en fotobiorreactores [3].

Es por ello que es de suma importancia tener la capacidad de estimar las propiedades ópticas del cultivo de microalgas para poder describir la interacción de la intensidad de radiación con los microorganismos dentro del fotobiorreactor. La correcta descripción del cambio de la intensidad de radiación a través de un fotobiorreactor es de gran ayuda para el desarrollo de modelos que describen el crecimiento de estos microorganismos fotosintéticos [4].

El modelado físico del transporte de radiación acoplado a la cinética de crecimiento y la actividad metabólica puede facilitar el diseño, la optimización y operación de fotobiorreactores. Para ello es conveniente tener la capacidad de predecir las características radiativas de estos microorganismos de manera rápida y eficiente, para poder describir la cantidad de energía que absorben para impulsar la fotosíntesis [2,5].

Las características radiativas de las microalgas son fuertemente dependientes de la longitud de onda y varían de una especie a otra. Estas pueden ser determinadas ya se experimentalmente o con base en la teoría de ondas electromagnéticas [4,5]. Este último enfoque supone que los dispersores (partículas) tienen una forma relativamente simple (esférica) e ignoran su naturaleza heterogénea. En el caso de microorganismos con formas complejas (cilindros y esferoides), se requieren herramientas numéricas avanzadas para predecir sus coeficientes de absorción, dispersión y función de fase. Por otro lado, las mediciones experimentales representan la forma real, la morfología y la distribución del tamaño de los microorganismos [2].

El presente estudio tiene como objetivo principal desarrollar e implementar una nueva y rápida metodología teórico - experimental para la estimación rápida de las propiedades ópticas: coeficiente de extinción (β), albedo (ω) y parámetro de asimetría (g) de la función de fase (Φ) de Henyey-Greenstein del cultivo de microalgas *Chlorella vulgaris* UTEX 2714. Las propiedades se reportan en el intervalo de 400 - 700 [nm]. Se hace uso de un enfoque teórico (óptica geométrica) y el método de Monte Carlo Ray Trace para poder estimar los valores de las propiedades radiativas de esta microalga de estudio.

2. ANTECEDENTES

2.1. Microalgas

Estos microorganismos fotosintéticos pueden ser procariotas o eucariotas y presentar una estructura multicelular o unicelular. Ejemplos de microorganismos procariotas son cianobacterias (*Cyanophyceae*) y ejemplos de microorganismos eucariotas son las microalgas, por ejemplo, algas verdes como la (*Chlorella vulgaris*) y diatomeas (*Bacillariophyta*) [6]. Las microalgas tal como su nombre lo indica, son microscópicas (2-200 μm). Muchas de ellas son unicelulares y pueden ser móviles o inmóviles dependiendo de la presencia de flagelos [7].

El cultivo de microalgas han recibido gran atención por su alta tasa de crecimiento, alta tasa de fijación de CO_2 y la generación de productos de valor agregado. Por ejemplo, proteínas, pigmentos, y carbohidratos. Estos microorganismos están presentes en todos los ecosistemas terrestres existentes, no solo acuáticos sino también terrestres. Se estima que existen más de 50,000 especies, pero solo un número limitado, de alrededor de 30,000, se han estudiado y analizado [6]. Además, estos microorganismos son capaces de capturar energía solar y transformarla en energía química a partir del proceso de fotosíntesis, produciendo aproximadamente la mitad del oxígeno atmosférico en la tierra y absorbiendo grandes cantidades de dióxido de carbono como alimento principal [8].

Una de las características adaptativas que presentan las microalgas es la capacidad de absorber rápidamente los nutrientes y acumularlos intracelularmente para su producción y mantenimiento celular. La nutrición es por absorción iónica de C, H, O, N, P, S, K, Ca, Fe y Mg y cantidades traza de Mn, B, Co, Zn y Mo, sin embargo, para algunas especies si necesarias otras moléculas inorgánicas y orgánicas complejas, incluyendo la vitamina B₁₂. En determinadas condiciones estos microorganismos pueden aumentar casi el doble de su masa celular, en periodos de 24 horas, y durante su fase de crecimiento exponencial, hasta 3.5 horas [7].

Las microalgas representan una enorme biodiversidad de la cual como se mencionó anteriormente solo una determinada cantidad de especies han sido estudiadas. Una de las más notables es la microalga *Chlorella vulgaris*. Es una microalga unicelular que crece en agua dulce y tiene un alto contenido de proteínas (mayor a 55 % de peso seco). En la siguiente sección se presentan más características de este tipo de microalga, tales como tamaño, forma, tiempo de duplicación, etc. [9].

2.2. *Chlorella vulgaris*

La microalga *Chlorella vulgaris* es una microalga unicelular con forma esférica y un diámetro de 1-6 μm . Esta particular especie de microalgas verdes ha ganado atención especial por su gran productividad de biomasa y su corto tiempo de duplicación (24 horas). Además, es una importante fuente de producción de carotenoides y lípidos para producción de biocombustibles [4].

La estructura (representada en la figura 1) de este microorganismo está compuesta por (1) la pared celular que se encarga de principalmente de preservar la integridad de la célula y es básicamente una protección contra invasores ambientales. Varía de acuerdo a cada fase del crecimiento. (2) Citoplasma, sustancia compuesta por agua, proteínas solubles y minerales, encargada de albergar orgánulos internos, núcleo, vacuolas, un único cloroplasto y aparato de Golgi. (3) Mitocondria la cual contiene algunos materiales genéticos. (4) La *Chlorella vulgaris* tiene un solo cloroplasto con doble membrana compuesto de fosfolípidos; la membrana externa es permeable a metabolitos e iones, pero la membrana interna tiene una función más específica en el transporte de proteínas [9].

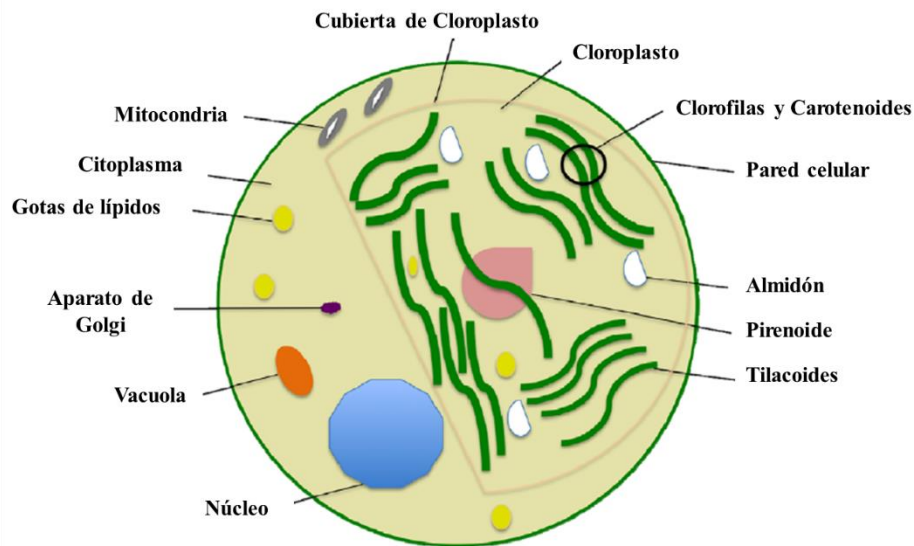


Fig. 1 Representación esquemática de la estructura de los diferentes organelos de *Chlorella vulgaris*.

Modificado de [9].

2.3. Pigmentos absorbedores de luz

La fotosíntesis comienza con la absorción de fotones por el aparato fotosintético que consta de tres componentes principales (i) el centro de reacción, (ii) la antena central y (iii) la antena periférica. La separación de carga fotoquímica y el transporte de electrones tienen lugar en el centro de reacción. La antena central contiene los pigmentos fotosintéticos clorofilas o bacterioclorofilas. Dicha antena está rodeada por la antena periférica, que es un conjunto de clorofilas, bacterioclorofilas y otros pigmentos accesorios como los carotenoides y las ficobiliproteínas. La antena periférica es particularmente importante para canalizar energía proveniente de fotones adicional al centro de reacción a pequeñas intensidades de luz. En las microalgas y las cianobacterias, el aparato fotosintético se encuentra en la membrana fotosintética llamada tilacoide [2].

Las diferentes moléculas de los pigmentos absorben sobre diferentes bandas espectrales de las partes visibles e infrarrojas cercanas del espectro, lo que permite un uso más eficiente de la energía solar. La Figura 2 muestra el coeficiente de absorción específico *Ea in vivo* en [m²/mg] de pigmentos primarios como los carotenoides fotosintéticos (PSC) y los carotenoides fotoprotectores (PPC) medidos sobre la región espectral de 400 - 700 [nm]. Indica que la clorofila a (Chl a) absorbe alrededor de 435 y 676 [nm] mientras que la clorofila b (Chl b) absorbe alrededor de 475 y 650 [nm]. Debido a que no absorben de manera significativa la luz verde que se encuentra en una región de longitud de onda de 520 - 570 [nm], estos microorganismos se muestran de color verde para el ojo humano. Por otra parte, los carotenoides son pigmentos que se encuentran en todos los microorganismos fotosintéticos. Absorben principalmente en la parte azul del espectro ($\lambda = 400$ y 500 [nm]). Los carotenoides cumplen dos funciones principales (i) proteger al aparato fotosintético de la fotooxidación bajo grandes intensidades de luz e (ii) incrementar la eficiencia del uso de la luz solar al expandir el espectro de absorción del microorganismo [2].

Los pigmentos más abundantes en *Chlorella vulgaris* son las clorofilas a y b, que pueden alcanzar del 1-2 % en peso seco y están situadas en los tilacoides. *C. vulgaris* también contiene cantidades importantes de carotenoides que actúan como pigmentos accesorios al captar luz; el β -caroteno, por ejemplo, está asociado con las gotas de lípidos en el cloroplasto, y en los carotenoides primarios están asociados con la clorofila en los tilacoides, donde capturan la energía luminosa y la transfieren al fotosistema. Sin embargo, como en las plantas terrestres, algunos pigmentos actúan como foto-protectores al proteger las moléculas de clorofila de la degradación y la pérdida de color durante una fuerte exposición a la radiación y al oxígeno [9].

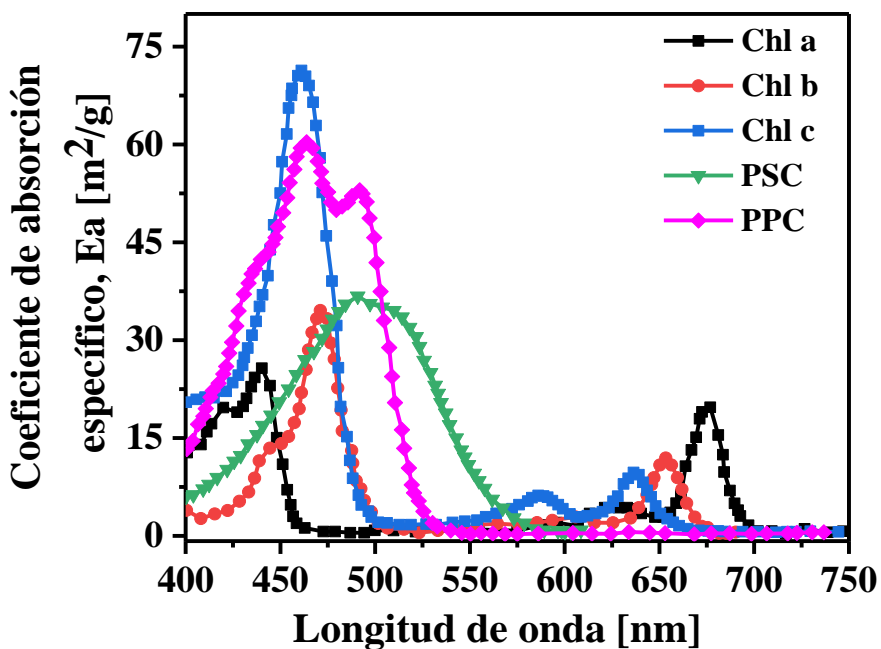


Fig. 2 Coeficiente de absorción específico E_a in vivo en $[m^2/mg]$ de pigmentos primarios: clorofilas a, b y carotenoides fotosintéticos (PSC) y los carotenoides fotoprotectores (PPC) medidos sobre la región espectral de 400 - 700 $[nm]$ [2].

2.4. Fotosíntesis

El proceso por el cual las microalgas sintetizan carbohidratos es la fotosíntesis y requiere energía solar, dióxido de carbono, y nutrientes para producir glucosa y oxígeno. La fotosíntesis es un proceso de óxido reducción que se lleva a cabo en dos fases, i) fase dependiente de luz y ii) fase independiente de la luz (fase oscura).

El proceso de la fotosíntesis comienza con la absorción de fotones por los pigmentos recolectores de luz, principalmente *clorofilas* las cuales se encuentran en los tilacoides y absorben parte importante de la energía de radiación fotosintética (PAR; 400-700 nm). La energía capturada por estos pigmentos se transfiere a los centros de reacción conocidos como fotosistema I (PSI) y fotosistema II (PSII). Ambos fotosistemas tienen un par especial de moléculas de *clorofila* en el centro de reacción del fotosistema, en el PSI se llama P700, mientras que el del PSII se llama P680.

En el PSII un electrón de alta energía pasa a una molécula aceptora y es remplazado por un electrón del agua. Esta división del agua libera O_2 , el electrón de alta energía recorre una cadena de transporte de electrones y pierde energía a medida que avanza. Parte de la energía liberada provoca el flujo de iones H^+ del estroma hacia el interior de los tilacoides y forma un gradiente en el cual los H^+ de la división del agua también se incorporan al gradiente.

Conforme los iones H^+ fluyen hacia el estroma, pasan a través de la ATP sintasa, que estimula la producción de ATP (adenosín - trifosfato) en un proceso conocido como quimiosmosis [10].

Entre el fotosistema II y I se lleva a cabo el transporte de electrones, estos electrones se unen a los centros de reacción de los fotosistemas y se transfieren a moléculas aceptoras donde pasan de estados de mayor a menor energía para la formación de NADPH (nicotín adenin dinucleótido fosfato) y ATP. Estos sub procesos son parte de la denominada fase luminosa de la fotosíntesis. La energía luminosa transformada en energía química en forma de ATP y NADPH es utilizada en el ciclo de reducción del carbono (ciclo de Calvin) que se lleva a cabo en el estroma. A continuación, se describe con más detalle la fase luminosa y la fase oscura (dependiente e independiente de la luz, respectivamente) del proceso de fotosíntesis [10].

2.4.1. Fase luminosa

La transferencia de electrones comienza con la clorofila (fotosistema I), en las membranas tilacoides de los cloroplastos. Un fotón de suficiente energía puede impactar con uno de los electrones periféricos de la molécula y desprenderlo. El electrón desprendido es altamente energético y se mueve a través de una cadena de enzimas transportadoras, liberando su energía. Una de éstas es el $NADP^+$ (fosfato de nicotinamida adenín-nucleótido oxidado), que al recibir un electrón se reduce a NADPH. Si no hay $NADP^+$ disponible, los electrones retornan a la molécula de clorofila a través de otros transportadores del grupo de los citocromos. La energía liberada por el electrón al regresar a su estado fundamental en parte se almacena como ATP (adenosín - trifosfato) y en parte es emitida como fluorescencia. La producción de ATP a partir de ADP (adenosín-difosfato) y P_i (radical fosfato) se llama fosforilación. El papel del fotosistema I es, en síntesis, la fosforilación y la reducción del $NADP^+$ [11].

A diferentes longitudes de onda, otro fotosistema (II) puede ser excitado por la luz para desprender un segundo electrón. En las clorofitas y en las plantas terrestres este fotosistema está constituido por la *clorofila b* y un pigmento denominado P680. Lo mismo que en el fotosistema I, este electrón de alta energía es transportado a través de una cadena de enzimas, produciendo fosforilación en el trayecto. Este segundo electrón es utilizado para llenar el hueco electrónico dejado por el primer electrón en el fotosistema I. De esta manera, la *clorofila a* recupera su electrón y vuelve a su estado fundamental para ser nuevamente excitada. A su vez, el hueco electrónico del fotosistema II es llenado por otro electrón que proviene de la fotólisis del agua [11].

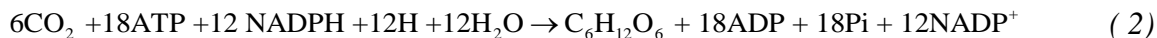
En síntesis, la función del fotosistema II es la producción de oxígeno a partir del agua. En lo sucesivo, la luz solar no es necesaria para el proceso, por lo cual la siguiente etapa se denomina fase oscura. Lo que hasta el momento se ha descrito se puede expresar en la reacción:



2.4.2. Fase oscura

En el estroma del cloroplasto, el NADPH y el ATP producidos en la fase luminosa almacenan la energía luminosa en forma de enlaces químicos. Ambas son moléculas capaces de transferir su energía para la formación de nuevos enlaces moleculares. De hecho, se utilizan en la fase oscura (independiente de la luz) para la reducción del CO₂ a glucosa, este proceso es llamado ciclo de Calvin.

La ribulosa-1,5-difosfato (**RuBP**) y el CO₂ son los sustratos para la enzima principal de la reducción de carbono: ribulosa-1,5-difosfato carboxilasa / oxigenasa (**Rubisco**). El primer producto de carboxilación de RuBP por Rubisco es el gliceraldehido-3-fosfato (G3P o PGA) un compuesto con tres átomos de carbono. El ciclo de Calvin comienza con 6 moléculas de CO₂ que reaccionan con 6 moléculas de RuBP (molécula formada por 5 carbonos y 2 grupos fosfato) para formar 12 moléculas de G3P (molécula de 3 carbonos con un grupo fosfato), la energía necesaria para llevar a cabo esta reacción proviene de 12 moléculas de ATP y de 12 de moléculas NADPH las cuales se transforman en 12 moléculas de ADP y 12 Pi (grupos fosfatos) y 12 de NADP⁺, posteriormente se usan 10 de las 12 moléculas de G3P para volver a formar 6 moléculas de RuBP este proceso nuevamente necesita energía por lo que se utilizan 6 moléculas de ATP, en esta etapa del ciclo se obtienen 6 moléculas de ADP y 4 Pi, estas 4 moléculas de Pi provienen de las 12 moléculas G3P de la reacción anterior. Por lo tanto, los grupos fosfatos de los 6 ATP se unen a las moléculas de RuBP completando el ciclo de Calvin, debido a que solo se reutilizan 10 de las 12 moléculas de G3P en cada ciclo de obtienen 2 moléculas de G3P con las que se puede producir glucosa o cadenas de carbohidratos más largas [12]. La ecuación global en la fase oscura es:



2.5. Sistemas de cultivo de microalgas

En el cultivo de estos microorganismos fotosintéticos, existen 2 diseños básicos: cultivos abiertos, donde la biomasa está expuesta a las condiciones ambientales; y cerrados, denominados FBRs, con poco o nulo contacto con el medio externo [13].

El sistema de cultivo es diseñado en base a diversos criterios: la biología de la(s) especie(s) a cultivar; forma de cultivo: requerimientos nutricionales, lumínicos y resistencia al estrés; relación de la superficie iluminada / volumen del reactor que determina la velocidad de crecimiento; orientación e inclinación; sistemas de limpieza y de regulación de la temperatura; transparencia y durabilidad del material. Por último, son también importantes costos de construcción para fines comerciales [14].

2.5.1. Sistemas de cultivos abiertos

Son los sistemas más comunes. Comprenden tanto medios naturales, como lagunas y estanques artificiales con una variedad de diseños. Por ejemplo, el más utilizado es el High Rate Algal Ponds (HRAP), el cual consta de un estanque con una profundidad de entre 15 a 30 cm, dividido por un muro central formando 2 canales (Figura 3). Este sistema es de los más rentables, ya que puede ser utilizado para el tratamiento de aguas residuales de distintas fuentes, lo que disminuye los costos por requerimientos nutricionales del cultivo, pudiendo alcanzar una concentración celular hasta de 0.7 g/L. Las ventajas de los sistemas abiertos radican en su bajo costo y facilidad de construcción y operación, así como en la alta durabilidad. Como desventajas encontramos baja accesibilidad de células a la luz, lo cual provoca baja productividad y que tiene gran susceptibilidad a la contaminación [14].

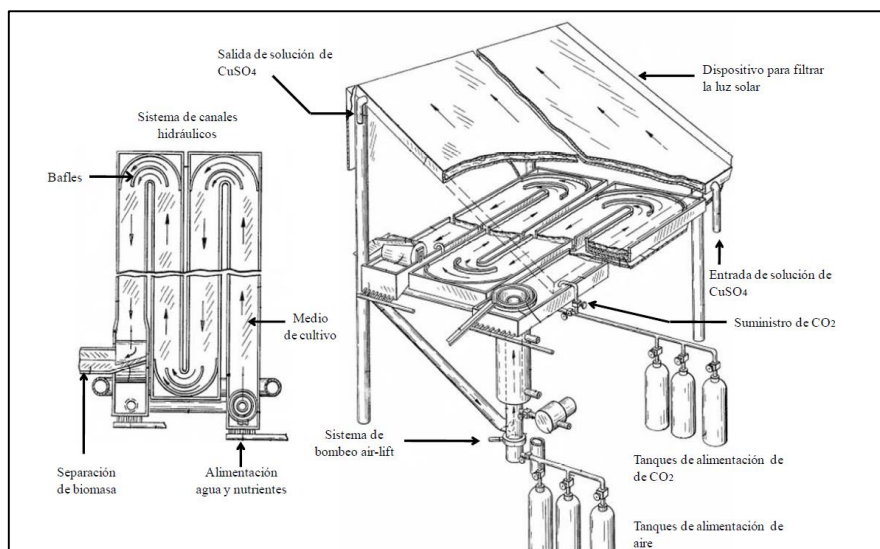


Fig. 3. Representación esquemática de un proceso para el cultivo de microalgas (sistema abierto), en contacto con la atmósfera [7].

2.5.2. Sistemas de cultivos cerrados (FBRs)

Las dificultades en los sistemas de cultivo abierto han favorecido al desarrollo de los sistemas de cultivo cerrado. Estos permiten un importante control de los parámetros, disminuyendo sustancialmente los problemas presentes en sistemas abiertos.

Un FBR típico es un sistema trifásico que incluye el medio de cultivo como la fase líquida, las células como la fase sólida y el aire enriquecido con CO_2 como la fase gaseosa en el cultivo autofototrófico. Como característica única, la luz en un FBR es un campo de radiación superpuesto que generalmente se denomina cuarta fase. La intensidad de la luz disminuye bruscamente debido a la absorción y dispersión por los fluidos; por lo tanto, el campo de radiación en un FBR es altamente heterogéneo. Es bien sabido que la disponibilidad de luz es el factor limitante para el crecimiento celular en un FBR. Los diseños en FBRs son variados y cada uno cuenta con ventajas y desventajas frente a los demás [9, 10]. Algunos ejemplos de ellos pueden observarse en la Figura 4.

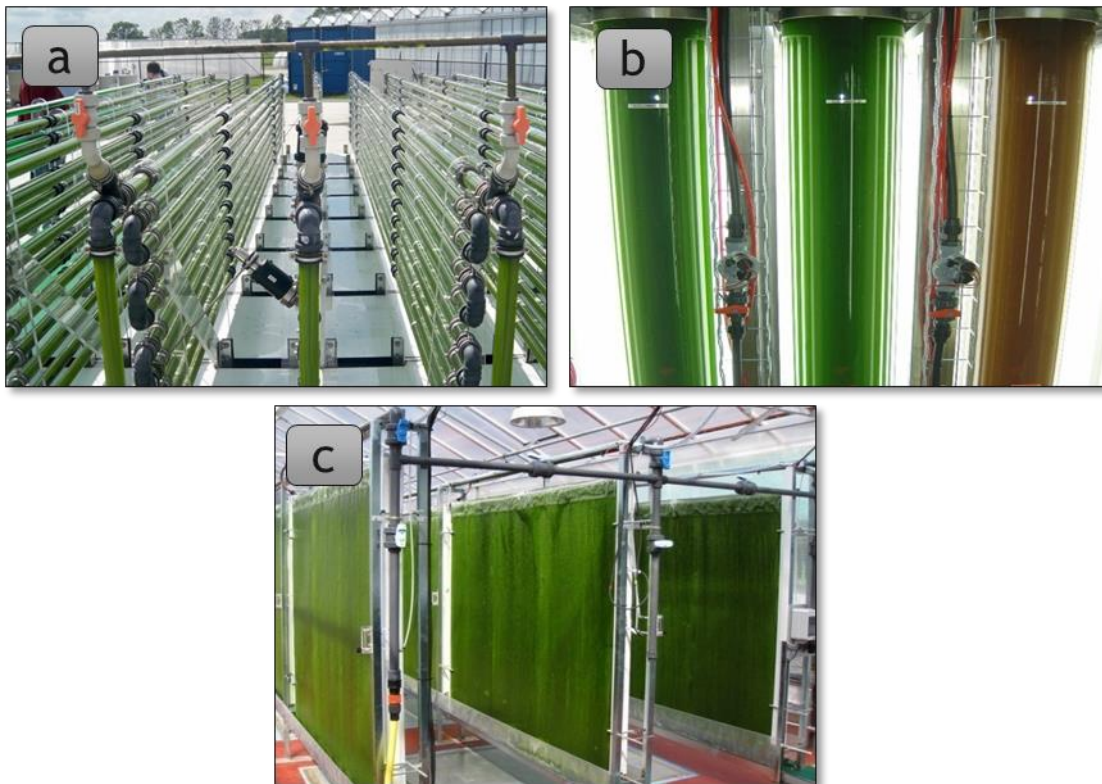


Fig. 4 Representación de los diferentes tipos de FBRs para cultivo de microalgas. a) Tubular horizontal, b) Tubular vertical y c) Placas planas.

Entre los diferentes diseños están los sistemas de tubular (horizontales) los cuales cuentan con una gran área iluminada y una alta producción de biomasa, pero son de difícil mantenimiento y tienen una alta acumulación de O_2 . Por otra parte, están los sistemas de columna (vertical) cuyos sistemas cuentan con una alta penetración de luz y baja acumulación de O_2 , pero las mayores desventajas que tiene es que tiene un bajo nivel de mezclado y existe adherencia de biopelícula en las paredes de la columna.

Otro diseño más de sistemas cerrados para el cultivo de microalgas es el sistema de placas planas el cual tiene como ventajas la reducción de foto inhibición y un mejor control de variables exógenas (pH, CO_2 , temperatura e intensidad de luz) pero como desventaja cuenta con baja área de superficie iluminada [7].

Una descripción más general sobre las principales ventajas y desventajas entre los sistemas abiertos y los FBRs de columna, de placas y tubulares se presentan en la tabla 1.

SISTEMA	VENTAJAS	DESVENTAJAS
Abierto	<ul style="list-style-type: none"> • Construcción económica • Fácil mantenimiento • Bajo consumo de energía • Construcción a escala industrial 	<ul style="list-style-type: none"> • Baja productividad de biomasa • Grandes áreas para el cultivo limitados al cultivo de pocas especies • Bajo nivel de mezclado • Susceptible a contaminación.
FBRs con sistema de burbujeo.		
Tubular	<ul style="list-style-type: none"> • Alta área de superficie iluminada • Alta productividad de biomasa • Relativamente económicos • Operación en condiciones externas 	<ul style="list-style-type: none"> • Difícil mantenimiento • Grandes áreas de superficie • Baja transferencia de masa • Alta acumulación de O₂ • Sensible a efectos de fotoinhibición • Sensible a efectos de fotooxidación • Gradientes de pH, O₂ y CO₂ en la fase líquida.
Placa	<ul style="list-style-type: none"> • Alta área de superficie iluminada • Alta penetración de luz • Alta productividad de biomasa • Operación en condiciones externas • Baja acumulación de O₂ • Alta eficiencia fotosintética 	<ul style="list-style-type: none"> • Altos esfuerzos de corte • Difícil control de temperatura • Bajo nivel de mezclado • Adherencia de biopelícula en las paredes
Columna	<ul style="list-style-type: none"> • Bajos esfuerzos de corte • Relativamente económicos • Alto nivel de mezclado • Fácil operación • Fácil control de variables • Alta tasa de transferencia de masa • Se reducen efectos de fotooxidación y fotoinhibición • Alta tasa de reacción por unidad de reactor 	<ul style="list-style-type: none"> • Baja área de superficie iluminada

Tabla 1 Ventajas y desventajas en diferentes sistemas para el cultivo de microalgas [7].

2.6. Principales factores para el diseño de fotobiorreactores

Para un diseño eficiente de FBRs, la penetración y distribución de luz dentro del reactor son factores dominantes. Adicionalmente, buenas condiciones de mezclado y transferencia de masa, además de condiciones de temperatura y pH favorables, puede significativamente mejorar el crecimiento del cultivo de microalgas. Finalmente, costos de capital y operación son factores cruciales en el diseño de un fotobiorreactor [15].

2.6.1. Suministro de luz

Debido a que la radiación solar es abundante y no tiene costo, la luz natural es a menudo empleada para el cultivo de microalgas, resultando en una reducción remarcable de costo. Sin embargo, la luz solar incidente inevitablemente cambia debido al clima, ciclos diurnos y la estación del año [15].

La calidad espectral de la luz es otro factor importante a considerar en el diseño de FBRs. Mientras la luz solar cubre un amplio rango espectral, solo la luz dentro del rango de 400 y 700 [nm] es radiación fotosintética activa (Photosynthetic Active Radiation, PAR), la cual representa aproximadamente el 50 % de la luz solar. Por lo tanto, existe una barrera natural para mejorar la eficiencia fotosintética y la eficiencia fotosintética real es aún menor debido a pérdidas como la reflexión de la luz y la respiración celular. Además, la luz en ciertas frecuencias (por ejemplo, ultra violeta) es letal para las células.

La distribución de la intensidad de luz es crucialmente no uniforme dentro de los FBRs debido a la absorción y dispersión en el cultivo, y la atenuación de la radiación depende de la longitud de onda de la luz, concentración celular, la geometría del (FBR) y la distancia de penetración de luz. Si la intensidad de la luz está por encima de un valor crítico y alcanza el nivel de saturación, la luz (fotoinhibición) inhibirá el crecimiento y la luz se perderá [13]. Por otro lado, si la intensidad de la luz está por debajo del nivel necesario para mantener el equilibrio, el crecimiento estará limitado por la luz (fotolimitación) y el cultivo colapsará [16].

Basado en la tasa de crecimiento celular, un FBR puede ser sucesivamente dividido en tres zonas distintas: (i) zona de iluminación fuerte, la cual tiene un efecto inhibitorio y se extiende desde la pared iluminada hasta el punto donde la energía luminosa que llega simplemente equilibra el nivel de intensidad de luz necesaria para el crecimiento celular a la velocidad máxima; (ii) zona de iluminación débil, la cual termina en el punto donde la energía lumínica de entrada cumple con los requerimientos de energía para el mantenimiento; y finalmente (iii) la zona oscura, donde la tasa de crecimiento celular es negativa debido a la limitada disponibilidad de luz [15].

2.6.2. Mezclado

El mezclado es una característica crucial en el cultivo de microalgas, esto no solo puede reducir los gradientes de nutrientes, pH y temperatura en el cultivo, sino que también evita la sedimentación celular, la aparición de zonas muertas, la acumulación de células y la unión de las células a las paredes del FBR. Además, el mezclado garantiza que todas las células estén igualmente expuestas a la luz y promueve la transferencia de masa entre fases. A velocidades superiores a 1 m/s, se producen micro remolinos con diámetros menores a 50 μm , lo cual podría dañar las células, y se recomiendan velocidades de líquido de 20-50 cm/s [17].

El tiempo de mezclado se ve afectado no solo de manera axial y radial, sino también por el volumen de flujo. La mezcla en el FBR suele ser inducida por aireación con burbujas de gas enriquecidas con CO_2 o por bombeo, agitación mecánica por impulsor o mezclador estático, o una combinación de estos métodos. Se aceptó ampliamente que la mezcla, que produce un ciclo de luz / oscuridad favorable (ciclo L/D, es decir, efecto de luz intermitente) al transportar células de microalgas entre la zona fótica y la zona oscura, altera notablemente el campo de radiación en el reactor para favorecer la conversión fotosintética. Debido a que la conversión fotosintética es un proceso dinámico en las células de las microalgas, se piensa que los ciclos L/D beneficiosos modifican las tasas de crecimiento de las células fotosintéticas. Por lo tanto, el mezclado tiene un papel importante en asegurar la redistribución de intensidad de luz en el FBR [18].

2.6.3. Transferencia de masa

Es bien sabido que el crecimiento celular de las microalgas implica tres procesos celulares que compiten entre sí: la fotosíntesis, la fotorrespiración y la respiración oscura. La fotosíntesis de las microalgas hace uso de la energía de la luz y el CO_2 para suministrar oxígeno (O_2) como subproducto. Sin embargo, a altas concentraciones de oxígeno disuelto (OD), la ribosa-1,5 bifosfato carboxilasa oxigenasa, que es la principal enzima de carboxilación que ofrece CO_2 para el ciclo de Calvin, también puede consumir O_2 para producir CO_2 para la fotorrespiración [19].

Además, gran parte de OD, que se libera como un subproducto de la fotosíntesis se acumula en el cultivo, lo que ocasiona un alto nivel tóxico que puede amenazar la supervivencia de las microalgas. Una alta acumulación de OD podría dar lugar a una fuerte inhibición del crecimiento celular, especialmente en sistemas cerrados como los FBRs tubulares, donde el OD acumulado se elimina solo en el desgasificador mediante transferencia de masa. Debido que el OD no solo oxida una o más enzimas, sino que también afecta la cadena de transmisión de electrones y suprime el proceso de fotosíntesis, por lo cual el contenido de OD en el cultivo debe limitarse a un cierto rango durante el cultivo de microalgas. Chisti [20] propuso que la concentración de OD nunca debería superar aproximadamente el 400% del valor de

saturación del aire para prevenir tales efectos inhibitorios, mientras que Ugwu et al. [21] observo una fuerte disminución en la productividad celular para *C. sorokiniana* cuando la concentración de OD supero solo el 200 % del valor de saturación del aire (es decir, 448 $\mu\text{mol} / \text{L}$).

El CO_2 es generalmente la fuente de carbono en el cultivo de microalgas en cultivos fotoautótrofos, y solo puede ser utilizado en la fase líquida. El suministro de CO_2 puede ser un factor de restricción si la concentración de CO_2 disuelto en la fase líquida es demasiado baja (Por ejemplo, cuando se utiliza aire como gas de alimentación o cuando la longitud de un FBR tubular es demasiado larga) o si el mezclado es insuficiente. Posten [17] argumento que el CO_2 debe suministrarse en concentraciones suficientemente altas para evitar limitar el crecimiento celular. Se recomienda que la presión parcial de CO_2 sea superior a 0.2 kPa (es decir, 0.076 mol / m³ que es equivalente a 3.3 mg / L). Dado a que la presión parcial de CO_2 en la atmosfera es de 0.04 kPa, el aire puro (es decir, de CO_2 de 0.035% por volumen) es insuficiente para el suministro de CO_2 , y requiere una mezcla de gas enriquecida con CO_2 .

Por otra parte, una alta concentración de dióxido de carbono disuelto (DCD) puede conducir a un bajo pH de cultivo, lo cual también sería inhibitorio para algún celular de microalgas. Por lo tanto, mantener un nivel de DCD en un rango razonable es de suma importancia, y el nivel óptimo de DCD depende de la naturaleza de la especie. Por ejemplo, se reporta que las proporciones de volumen de aire y CO_2 de 1 % y 4 % eran las concentraciones óptimas para *N. Salina* y *Scenedesmus sp*, respectivamente, y en el caso de *Chlorella sp*. El crecimiento se produjo con una aireación de CO_2 del (10% - 15%). La eficiencia fotosintética máxima generalmente se obtiene cuando la concentración de CO_2 está en el rango de 1 % a 5 % por volumen. Es por ello que para el cultivo de microalgas, usualmente se diseña un espacio dedicado para el intercambio de gases en el FBR, y con ellos mantener un equilibrio óptimo de DCD y OD [19].

2.6.4. Temperatura

La temperatura es un factor principal el cual tiene un impacto en el equilibrio químico de la especie, la solubilidad del gas y del pH. La temperatura óptima para los cultivos de microalgas es generalmente entre los 20 °C y 24 °C, y la mayoría de las microalgas pueden tolerar una temperatura del agua entre 16 °C y 35 °C. Las tasas de crecimiento celular disminuirán cuando la temperatura sea inferior a 16 °C, y una temperatura superior a 35 °C es letal para algunas especies. Se ha mostrado que la temperatura en un FBR puede alcanzar un nivel de 10-30 °C más alto que la temperatura ambiente en verano sin un sistema de control de temperatura. Por lo tanto, un sistema de control de temperatura confiable y rentable es esencial en el diseño de un FBR para mantener la temperatura del cultivo dentro de un rango favorable [19].

2.6.5. pH

El pH óptimo de la mayoría de las especies de algas cultivadas está en el rango de 7–9. Sin embargo, algunas especies tienen un pH óptimo en rangos más ácidos o básicos. Por ejemplo, el pH óptimo de la cianobacteria *Spirulina platensis* está en el rango de 8.0-10.0. Es crucial mantener el pH del cultivo en el rango óptimo ya que el colapso completo del cultivo puede ocurrir debido a la interrupción de los procesos celulares por el pH extremo.

En el caso de sistemas controlados con cultivos de alta densidad algal utilizan aire enriquecido con dióxido de carbono (CO_2 puro o gases de combustión con alto contenido de CO_2), la concentración de CO_2 disuelto puede ser el factor dominante que determina el pH del cultivo. En tal escenario, CO_2 disuelto es el resultado del equilibrio entre la transferencia de masa de CO_2 desde la fase gaseosa hasta la fase líquida y el consumo de CO_2 por las células. Por lo tanto, el mecanismo de control del pH debe integrarse con el sistema de aireación, ya que agregar una solución básica al cultivo, que es una práctica estándar en los biorreactores convencionales, no podría controlar el pH del cultivo de manera efectiva [16].

2.7. Modelado de la relación entre la intensidad de luz y la fotosíntesis del cultivo de microalgas

La productividad de biomasa algal es el resultado de la fotosíntesis y la respiración endógena. Predecir la tasa de estos mecanismos durante el cultivo de microalgas en sistemas al aire libre o FBRs es un desafío porque la actividad de los microorganismos fotosintéticos está influenciada por diversos factores como la intensidad de luz, el mezclado, temperatura, pH, la concentración de oxígeno disuelto y la disponibilidad de nutrientes (transferencia de masa) factores que han sido explicados brevemente en la sección anterior. Para maximizar la producción de biomasa algal, los sistemas de cultivo no deberían limitarse por ningún otro factor que la cantidad de energía luminosa que llega al cultivo de microalgas. Debido a que factores como el pH puede mantenerse en su valor óptimo mediante la inyección de CO_2 . Por lo tanto, el modelado de la productividad algal (tasa de producción neta de biomasa algal) puede ser enfocada en función de la intensidad de luz y temperatura del cultivo de microalgas [22].

La relación fundamental entre la intensidad de luz y la fotosíntesis está representada por relaciones PI ($P =$ tasa fotosintética e $I =$ Intensidad de luz) que representan tres distintos regímenes de luz (Figura 5).

- 1) A bajas intensidades de luz, la tasa de fotosíntesis es usualmente proporcional a la intensidad de la luz porque la fotosíntesis está limitada por la velocidad de captura de fotones.
- 2) Cuando la intensidad de la luz alcanza un umbral de saturación (I_k), las microalgas se 'Saturan de luz' porque su tasa de fotosíntesis es ahora limitada por la velocidad de las

reacciones después de la captura de fotones. Bajo esta condición, la tasa de fotosíntesis es generalmente máxima e independiente de la intensidad de la luz.

3) Si la intensidad de la luz aumenta más allá de un umbral inhibitorio (I_{inhib}), la tasa de fotosíntesis comienza a disminuir con la intensidad de la luz debido a la desactivación de proteínas clave en las unidades fotosintéticas (unidad celular responsable del proceso fotosintético que conduce a la generación de ATP y NADPH) [22].

Hasta la fecha, más de 40 modelos que predicen la tasa de producción neta de biomasa algal han sido descritos en la literatura. La mayoría de estos modelos no fueron validados contra los datos experimentales y, por lo tanto, su evaluación comparativa puede solo ser hecha considerando los mecanismos biológicos que los diferentes modelos teóricamente pueden reportar. Por lo tanto, estos modelos se han categorizado y evaluado en función de su capacidad teórica para dar cuenta de los mecanismos biológicos relevantes para los sistemas a gran escala. A continuación se presentan algunos ejemplos de estos modelos y un resumen de los mismos puede verse en la (Figura 6) [22].

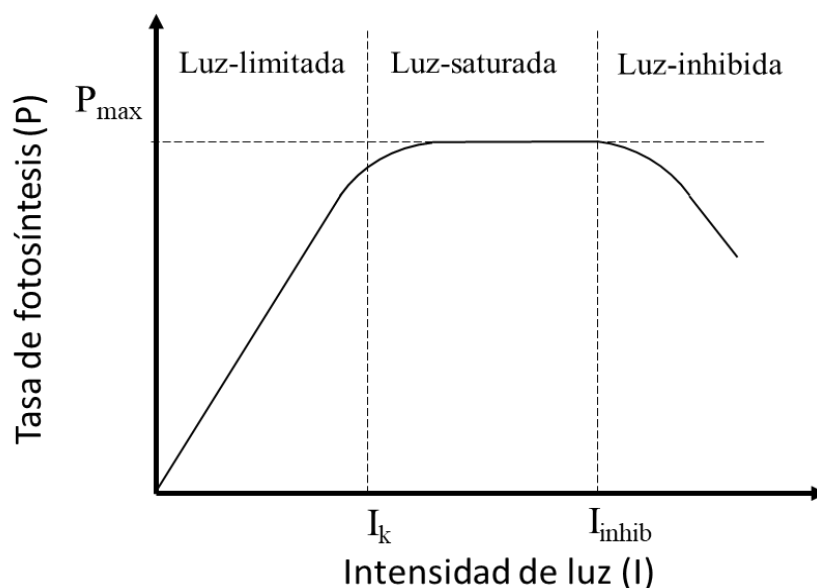


Fig. 5 Relación típica PI. Modificada de [22]

2.7.1. Modelo tipo I que utilizan la intensidad de luz incidente

Los modelos tipo I predicen la velocidad de fotosíntesis del cultivo entero de microalgas como función de la intensidad de luz incidente o el promedio de luz que llega al cultivo. Una primera sub categoría de los modelos tipo I expresa la tasa de fotosíntesis de todo el cultivo en función de la intensidad de la luz incidente (I_0) que llega a la superficie externa del sistema. Por ejemplo, Jeon et al. (2005)[22] modeló la tasa de fotosíntesis de un cultivo de *Haematococcus pluvialis* usando una función similar a Monod descrita como:

$$P = P_m \frac{I_0}{I_k + I_0} \quad (3)$$

Donde (P) [mg O₂/h-g de biomasa] es la velocidad específica de fotosíntesis, (P_m) [mg O₂/h-g de biomasa] es la velocidad máxima específica de fotosíntesis, (I_0) [μmol/m²-s] es la intensidad de luz incidente, y (I_k) [μmol/m²-s] es una constante. Los modelos tipo I son fáciles de implementar ya que (I_0) es simple de medir, pero los valores de los parámetros cinéticos dependen de las condiciones de operación específicas utilizadas para desarrollar y validar el modelo, lo que limita la universalidad de este enfoque. Por ejemplo, el parámetro cinético (P_m) y (I_k) usados en el modelo de Jeon et al. (2005)[22] se encontró que dependían de la concentración celular. En los sistemas de cultivo de microalgas al aire libre, la concentración celular es una función de la productividad neta y el tiempo de retención celular. Por lo tanto, los modelos tipo I que usan (I_0) deben usarse con considerable precaución para la estimación de la productividad algal en sistemas al aire libre fuera del rango de las condiciones experimentales utilizadas para su desarrollo.

Por otra parte, otra subcategoría de los modelos tipo I, son los modelos que utilizan la intensidad de luz promedio (I_{av}) para caracterizar el impacto de la concentración celular y la geometría del reactor. La razón de este enfoque es que los microalgas en un sistema bien mezclado están, en promedio, expuestas a la misma intensidad de luz, por lo tanto, tienen la misma tasa promedio de fotosíntesis. Sin embargo, los estudios empíricos han demostrado que los parámetros cinéticos asociados con estos modelos son de hecho funciones de las condiciones de operación, tales como la concentración celular, intensidad de luz incidente o el tamaño del sistema. Una posible explicación para estas observaciones es el hecho de que los modelos tipo I no toman en cuenta el impacto de los cortos ciclos de luz experimentados por las microalgas en cultivos muy densos. Además, microalgas cultivadas en dos sistemas expuestos a diferentes (I_0) pueden experimentar la misma (I_{av}) dependiendo de la concentración celular y la geometría del sistema. Por lo tanto, para la predicción de la productividad algal en sistemas al exterior, los modelos tipo I que usan (I_{av}) deben usarse dentro del rango de concentración celular, intensidad de luz incidente y geometría del sistema utilizada para su desarrollo [22].

2.7.2. Modelo tipo II

Los modelos tipo II toman en cuenta el impacto de los gradientes de luz en la tasa local de fotosíntesis. Estos modelos están contruidos por la cuantificación de la distribución de la luz dentro del cultivo de microalgas, la selección de un modelo biológico que expresa la tasa de fotosíntesis local en función de la intensidad de luz local, y la suma de las tasas locales de fotosíntesis para obtener la tasa global de fotosíntesis. Un ejemplo del enfoque de los modelos tipo II, se emplea cuando la tasa de fotosíntesis local puede ser calculada usando una función similar a Monod acoplada con la ley de Beer-Lambert para la distribución de la luz [22] , y se descrita como:

$$P(I) = P_m \frac{I_o \exp(-\beta C_b l)}{I_k + I_o \exp(-\beta C_b l)} \quad (4)$$

Donde $P(I)$ es la tasa volumétrica local de fotosíntesis a la distancia (l) de la frontera externa del sistema, (P_m) es la velocidad máxima de fotosíntesis, (I_k) es una constante de saturación, (I_o) es la intensidad de luz incidente, (β) es el coeficiente de extinción que indica el nivel de absorción de luz por el cultivo de microalgas, y (C_b) es la concentración de celular. La velocidad de fotosíntesis del sistema entero (P) entonces puede ser determinada por la integración de $P(I)$ sobre todo el volumen del sistema.

La evidencia de la literatura sugiere que los modelos tipo II pueden predecir con precisión la productividad algal en una amplia gama de condiciones y diseños operativos. Por ejemplo, existen trabajos en donde reportan que fue posible predecir con precisión la tasa de fotosíntesis de *Chlorella vulgaris* bajo diferentes intensidades de luz incidente y concentraciones de microalgas utilizando el modelo tipo II descrito por la Ec. (4). De manera similar , Cornet y Dussap (2009) [23] mostraron que un modelo del tipo II fue capaz de predecir la velocidad de fotosíntesis en 8 FBRs con diferentes geometrías con un nivel de precisión de ± 15 %.

Una predicción precisa del proceso de fotosíntesis durante el cultivo de microalgas en sistemas al aire libre debe explicar la inhibición por luz a altas intensidades. El grado de inhibición por luz experimentando por los microalgas en un cultivo denso bien mezclado esta teóricamente influenciado por los ciclos que sufren las microalgas entre las zonas de alta intensidad de luz cerca de la superficie y las zonas de baja intensidad de luz en áreas profundas. El efecto de estos ciclos de luz no se considera en los modelos de tipo II. Por lo tanto, el uso de este tipo de modelos para la predicción de la productividad algal a grandes escalas en exteriores puede sobre estimar el impacto de la inhibición de luz en el sistema de cultivo [22].

2.7.3. Modelo tipo III

Los modelos tipo III consideran que la tasa de fotosíntesis de una célula algal individual es función de su "historia de luz" (es decir, la intensidad de la luz experimentada por una célula algal individual en el tiempo a medida que se mueve en el sistema). El modelado del tipo III involucra la determinación la historia de luz de las células algales individuales; con base en su historia de luz, la estimación de la velocidad de fotosíntesis de las células algales individuales usando un modelo biológico dinámico, y la suma de las tasas de fotosíntesis de las células algales individuales para calcular la tasa total de fotosíntesis en el sistema de cultivo [22].

Con el fin de estimar la tasa de fotosíntesis de una célula algal individual, la mayoría de los modelos biológicos incluidos en los modelos tipo III se centran en las unidades fotosintéticas (PSUs) responsables de la captura de luz. Estos modelos asumen que la conversión de fotones en energía utilizable es un proceso de dos pasos donde las PSU interactúan primero con los fotones hasta que almacén una cantidad de energía suficiente para "PSU cargada" para producir ATP y NADPH. En general, se supone que la tasa de fotosíntesis es proporcional a la tasa de rotación del estado excitado al estado en reposo. Las PSUs pueden encontrarse en estado de reposo, donde las unidades de suministro de energía están en pausa, pero se moverán a un estado excitado si interactúan lo suficiente con los fotones; estado de excitación, donde las PSUs contienen energía fotoquímica necesaria para generar moléculas de NADPH y ATP, y estado inhibido, donde las PSUs no pueden procesar fotones hasta que las proteínas clave dañadas se regeneren (proceso de recuperación) [22].

Cuando los modelos tipo III son aplicados bajo iluminación constante y homogénea, la tasa de fotosíntesis se predice como:

$$P = P_s \frac{I}{1 + kI + k' I^2} \quad (5)$$

Donde (P) es la velocidad de fotosíntesis, y (P_s), (k) y (k') son constantes. Se ha demostrado que esta expresión describe con precisión la tasa de fotosíntesis de cultivos expuestos a una intensidad de luz constante y homogénea en varios estudios experimentales.

Debido a que los modelos tipo III se desarrollaron para tener en cuenta los ciclos cortos de luz, son teóricamente capaces de predecir la productividad durante el cultivo al aire libre de microalgas a gran escala. Sin embargo, las imprecisiones compuestas de tres sub-modelos (para la distribución de luz, trayectorias celulares y respuesta biológica) pueden afectar significativamente la precisión de la predicción general de los modelos tipo III [22].

Por otra parte, existen modelos para la determinación de la tasa de fotosíntesis del cultivo de microalgas que consideran el impacto de la temperatura en este proceso biológico. En los modelos de tipo I y tipo II una primera aproximación para modelar el efecto de la temperatura en la fotosíntesis es considerar la luz y temperatura como dos factores independientes. Por ejemplo, existen modelos del tipo I que expresan la velocidad de fotosíntesis como resultado de multiplicar una función del tipo Monod para la intensidad de luz promedio con la ecuación de Arrhenius para la temperatura. Si bien la ecuación de Arrhenius es usada en varios modelos, esta ecuación fue inicialmente desarrollada para predecir el impacto de la temperatura en reacciones químicas y no para predecir un impacto negativo de la alta temperatura en la actividad enzimática en sistemas biológicos. Para abordar esta limitación se modela la tasa de desactivación en función de la temperatura, empleando una doble expresión de Arrhenius para considerar la energía de activación para la fotosíntesis y la desnaturalización enzimática.

En contraste con las aproximaciones mencionadas anteriormente, se han desarrollado modelos que tienen como objetivo tener en cuenta la posible interdependencia de la luz y la temperatura en la tasa de fotosíntesis (modelos acoplados). Aunque, los modelos acoplados teóricamente presentan una mejor representación del impacto de la temperatura que los no acoplados, el paso limitante de la fotosíntesis no siempre depende de la temperatura. Además, los modelos acoplados requieren un gran número de parámetros para ajustarse experimentalmente.

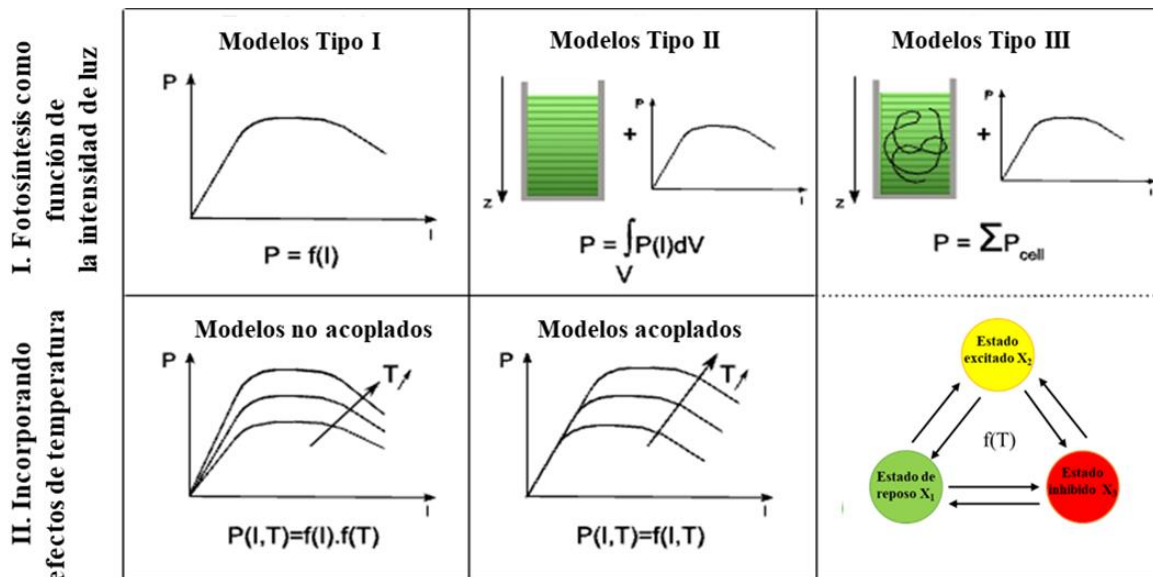


Fig. 6 Esquema representativo de modelos de productividad de microalgas. Modificado de [22].

Los modelos presentados anteriormente consideran que la intensidad de radiación que recibe el cultivo de microalgas es constante o es un promedio de toda la intensidad incidente, lo que puede llevar a un error en la estimación del campo de radiación sobre los cultivos de microalgas en sistemas abiertos o dentro de los fotobiorreactores, Por lo tanto, es necesario comprender lo distintos fenómenos de transporte radiativos como son las absorción, dispersión, trasmisión y atenuación que ocurren dentro de estos sistemas. La descripción de cada fenómeno radiativo será explicado en la siguiente subsección.

2.8. Transferencia de radiación en medios participativos

Las relaciones generales que rigen el comportamiento de transferencia de radiación en presencia de un medio de absorción, emisión y /o dispersión. Para ello es necesario realizar un balance de energía radiativa, conocido como la ecuación de transferencia de radiación (Radiative Transfer Equation, RTE), la cual describe el campo de intensidad radiativa dentro de un elemento, como una función de la posición (fijada por el vector posición r), dirección (fijada por el vector dirección unitario \hat{s}) y una variable espectral (longitud de onda λ). Para obtener el flujo radiativo neto que cruza un elemento de superficie, se debe sumar las contribuciones de la energía radiativa que irradia la superficie desde todas las direcciones posibles y para todas las longitudes de onda posibles.

Por lo tanto, la integración de la ecuación de transferencia radiativa sobre todas las direcciones y longitudes de onda conduce a una conservación de la declaración de energía radiativa aplicada a un volumen infinitesimal. Finalmente, esto se combinará con un equilibrio para todos los tipos de energía que se ilustran en la Figura 7 [24].

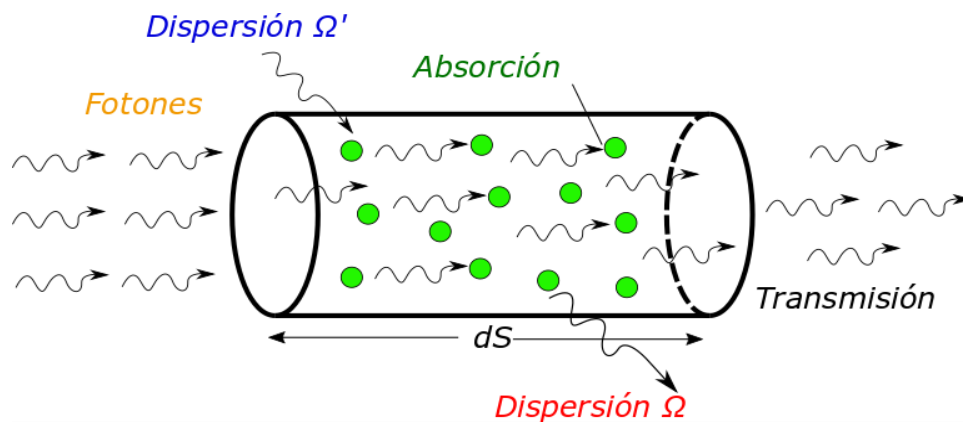


Fig. 7 Atenuación de la intensidad de radiación por absorción y dispersión. Modificado de [24].

2.8.1. Atenuación por absorción y dispersión

Si el medio a través del cual se propaga la energía radiativa es “participativo”, entonces cualquier haz incidente será atenuado por absorción y dispersión mientras se propaga a través del medio, tal como se muestra esquemáticamente en la figura 7. A continuación se presentan expresiones para la atenuación de un haz que viaja dentro de un lápiz de rayos en la dirección \hat{s} . La presente información se limita a medios con índice de refracción constante, es decir, medios a través de los cuales las ondas electromagnéticas viajan a lo largo de líneas rectas (mientras que un índice de refracción variable doblaría el rayo (tal como lo describe la ley de Snell), que no se polariza y que está en equilibrio termodinámico local [24].

2.8.2. Absorción

La cantidad absoluta de absorción es directamente proporcional a la magnitud de la energía incidente, así como a la distancia que recorre el haz a través del medio. Por tanto, se puede escribir de la siguiente forma [24]:

$$(dI_{\lambda})_{abs} = -\kappa_{\lambda} I_{\lambda} ds \quad (6)$$

Donde la constante de proporcionalidad (κ_{λ}) se conoce como coeficiente de absorción (espectral), y el signo negativo indica la disminución de la intensidad. Si la ecuación (6) es integrada sobre una trayectoria da como resultado [24]:

$$I_{\lambda}(s) = I_{\lambda}(0) \exp\left(-\int_0^s \kappa_{\lambda} ds\right) = I_{\lambda}(0) e^{-\tau_{\lambda}} \quad (7)$$

Donde

$$\tau_{\lambda} = \int_0^s \kappa_{\lambda} ds \quad (8)$$

Es el espesor óptico (para absorción) a través del cual el haz se ha propagado e $I_{\lambda}(0)$ es la intensidad que ingresa al medio en el punto $s = 0$. Se debe tener en cuenta que el coeficiente de absorción es el inverso del camino libre medio para un fotón hasta que se somete a absorción. También es posible definir la capacidad de absorción (absortividad) para el medio participante como [24]:

$$\alpha_{\lambda} = \frac{I_{\lambda}(0) - I_{\lambda}(s)}{I_{\lambda}(0)} = 1 - e^{-\tau_{\lambda}} \quad (9)$$

2.8.3. Dispersión

La atenuación por dispersión también conocido como “out-scattering” (“fuera” de la dirección considerada por el balance), es muy similar a la absorción, es decir, una parte de la intensidad entrante se elimina de la dirección de propagación, \hat{s} . Por lo tanto:

$$(dI_{\lambda})_{sca} = -\sigma_{\lambda} I_{\lambda} ds \quad (10)$$

La única diferencia entre los dos fenómenos es que la energía absorbida se convierte en energía interna, mientras que la energía dispersa simplemente se redirige y aparece como una fuente para otra dirección también conocida como “in-scattering” (a tratarse en la siguiente subsección). Donde la constante de proporcionalidad (σ_{λ}) es el coeficiente de dispersión (espectral) para dispersar desde el lápiz de rayos en consideración en todas las demás direcciones. También es posible definir un espesor óptico para la dispersión, donde el coeficiente de dispersión es el inverso del camino libre medio para la dispersión [24].

2.8.4. Atenuación total

La atenuación total en un lápiz de rayos por absorción y dispersión se conoce como extinción. Por lo tanto, el coeficiente de extinción (β_{λ}) se define como:

$$\beta_{\lambda} = \kappa_{\lambda} + \sigma_{\lambda} \quad (11)$$

La distancia óptica (τ_{λ}) basada en la extinción se define como [24]:

$$\tau_{\lambda} = \int_0^s \beta_{\lambda} ds \quad (12)$$

2.8.5. Aumento por emisión y dispersión

Un haz de luz que se propaga a través de un medio participativo en la dirección (\hat{s}) pierde energía por absorción y dispersión la cual se propaga fuera de la dirección de desplazamiento (\hat{s}). Pero al mismo tiempo, también gana energía por emisión, así como por dispersión proveniente de otras direcciones a la dirección de desplazamiento (\hat{s}) (Figura 8) [24].

2.8.6. Emisión

La tasa de emisión de un elemento de volumen será proporcional a la magnitud del volumen. Por lo tanto, la intensidad emitida (tasa de energía emitida por unidad de área) a lo largo de cualquier trayectoria debe ser proporcional a la longitud de la trayectoria, y debe ser proporcional a la energía local contenida en el medio. Por lo tanto:

$$(dI_\lambda)_{em} = j_\lambda ds \quad (13)$$

Donde (j_λ) se denomina coeficiente de emisión. Dado que, en el equilibrio termodinámico local, la intensidad en todas partes debe ser igual a la intensidad de un cuerpo negro (Ley de Kirchhoff) el coeficiente de absorción volumétrica (κ_λ) debe ser igual a la emisividad volumétrica (j_λ), lo cual implica que [24]:

$$j_\lambda = \kappa_\lambda I_{b\lambda} \quad (14)$$

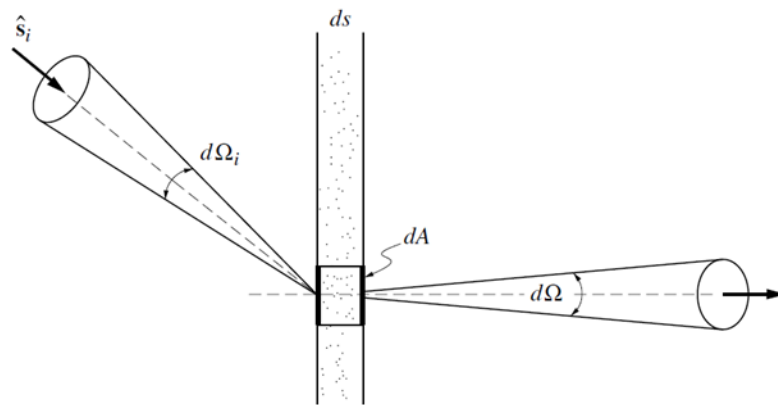


Fig. 8 Cambio de dirección de un haz incidente por dispersión [24].

2.8.7. Dispersión hacia dentro (in - scattering)

El incremento de intensidad debido a la dispersión (in-scattering) tiene contribuciones de todas las direcciones y, por lo tanto, debe ser calculada mediante la integración de todos los ángulos sólidos (Ω). Considerando un flujo de intensidad radiativa que incide en un elemento de volumen $dV = dA ds$, desde un lápiz de rayos infinitesimal en la dirección \hat{s}_i (Fig. 8). Recordando la definición de intensidad radiativa como flujo de energía por unidad de área normal a los rayos, por unidad de ángulo sólido y por intervalo de longitud de onda, se puede calcular el flujo radiativo espectral que incide en dA desde dentro del ángulo solido $d\Omega_i$ como:

$$I_\lambda(\hat{s}_i)(dA \hat{s}_i \cdot \hat{s}) d\Omega_i \quad (15)$$

Este flujo se propaga a través del diferencial de volumen (dV) por una distancia $ds/\hat{s}_i \cdot \hat{s}$. Por lo tanto, es la cantidad total de energía dispersada lejos de \hat{s}_i , de acuerdo a la Ec. (10) es:

$$\sigma_{\lambda}(I_{\lambda}(\hat{s}_i)(dA \hat{s}_i \cdot \hat{s})) d\Omega_i d_{\lambda} \left(\frac{ds}{\hat{s}_i \cdot \hat{s}} \right) = \sigma_{\lambda} I_{\lambda}(\hat{s}_i) dA d_{\lambda} ds \quad (16)$$

De esta cantidad la fracción $\Phi_{\lambda}(\hat{s}_i, \hat{s})d\Omega/4\pi$ se dispersa en el cono ($d\Omega$) alrededor de la dirección \hat{s} . La función (Φ_{λ}) se conoce como función fase de dispersión y describe la probabilidad de que un rayo de un dirección, (\hat{s}_i), será dispersado dentro de otra dirección, (\hat{s}). De acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi_{\lambda}(\hat{s}_i, \hat{s}) d\Omega \equiv 1 \quad (17)$$

Por lo tanto, si Φ_{λ} = constante, por ejemplo, si se dispersa cantidades iguales de energía en todas las direcciones (llamada dispersión isotrópica), entonces $\Phi_{\lambda} = 1$ [24].

2.9. Modelado de transferencia de radiación en fotobiorreactores

A medida que la luz penetra en el fotobiorreactor, es absorbida por los microorganismos o por el medio y dispersada por los microorganismos y, posiblemente, por las burbujas de gas utilizadas para liberar CO_2 y agitar la suspensión. Los microorganismos tienen un diámetro de 1 a 10 μm y son mucho más grandes que las longitudes de onda en el PAR [25]. Por lo tanto, el parámetro que define la naturaleza de interacción entre las longitudes de onda electromagnéticas y las partículas (microalgas) es mayor que 4, lo que indica que las microalgas puede ser tratadas como partículas grandes y estimar sus propiedades ópticas a través de la teoría radiativa (óptica geométrica) [24], otra característica es que la dispersión por las microalgas es fuertemente hacia adelante. Además, el índice de refracción con respecto al del agua varía de 1.04 a 1.07 y cambia en ± 0.01 sobre el rango espectral de 350 a 750 [nm]. El índice de absorción es aproximadamente 0.003 y varía en ± 0.003 sobre el mismo rango espectral [3].

Debido a la importancia crucial de la descripción de la energía radiativa en el modelado de un fotobiorreactor, es de suma importancia tener una visión general de las principales cantidades físicas involucradas en la medición y teoría de radiación [26].

Las tres principales cantidades físicas útiles en el campo del modelo de FBRs son: intensidad de radiación (I), densidad de flujo radiativo (q_x) y energía radiativa global (G) [26]. La primera variable medible (definida a partir de una superficie orientada elemental de

referencia (dA) a partir de la cual todas las demás cantidades radiativas son deducidas es la intensidad de radiación (I), la cual se define como el flujo de energía radiativo (dE) por unidad de ángulo sólido ($d\Omega$) y unidad de área normal a los rayos (dA) (opuesto al área de superficie) Ec. (18) [26].

$$I = \frac{dE}{dA \cos \theta} \quad [W \cdot sr^{-1} \cdot m^{-2}] \quad (18)$$

Esta cantidad direccional fundamental puede integrarse sobre el ángulo sólido ($d\Omega$), dando la definición de la densidad de flujo radiativo (\hat{q}) tal que el flujo a través de una superficie elemental (dA) a la normal (\hat{n}) es $\hat{q} \cdot \hat{n} dS$ [26].

En una dirección dada de (x), la proyección de (\hat{q}) es entonces:

$$q_x = \iint_{4\pi} I \cos \theta d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} I \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi \quad [W \cdot m^{-2}] \quad (19)$$

Donde ($\cos \theta$) es el ángulo entre la normal hacia afuera (\hat{n}) y la dirección considerada. Definiendo así la naturaleza vectorial de esta cantidad.

La tercera y última cantidad integral de interés, principalmente define la energía luminosa radiante total disponible para la fotosíntesis y luego formular la cinética y acoplamientos de energía, es la irradiancia esférica escalar Ec. (20):

$$G(x, y, z) = \iint_{4\pi} I d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} I \sin \theta d\theta d\phi \quad [W \cdot m^{-2}] \quad (20)$$

Esta cantidad puede evaluarse con un sensor esférico, el cual mide estrictamente una tasa de fluencia de energía, que se asume que es la irradiancia global si el diámetro del sensor es pequeño en comparación con la longitud de extinción característica de la radiación en el medio considerado [18].

2.9.1. Transferencia de radiación a través de microorganismos en suspensión

La intensidad de radiación solar $I_\lambda(\vec{x}, \hat{s})$ en $[W/m^2 * nm * sr]$ en una posición dada (\vec{x}) en la dirección (\hat{s}) en fotobiorreactores o estanques abiertos que contienen microorganismos en suspensión absorbentes, dispersantes, y no emisores junto con burbujas está compuesto de un componente colimado y uno difuso, denotados por $I_{c\lambda}(\vec{x}, \hat{s})$ y $I_{d\lambda}(\vec{x}, \hat{s})$, respectivamente [3] y puede ser escrito como Ec. (21).

$$I_\lambda(\vec{x}, \hat{s}) = I_{c\lambda}(\vec{x}, \hat{s}) + I_{d\lambda}(\vec{x}, \hat{s}) \quad (21)$$

La intensidad de radiación (I_λ) puede ser determinada por la solución de la ecuación de transferencia de radiación (RTE), la cual es un balance de energía radiativa que propaga a lo largo de una dirección en particular (\hat{s}). Representado mediante la siguiente ecuación integro-diferencial [24].

$$\frac{dI_\lambda(\hat{s}, \Omega)}{ds} = -(\kappa_\lambda + \sigma_\lambda)I_\lambda(\hat{s}, \Omega) + j_\lambda^e(\hat{s}) + \frac{1}{4\pi} \sigma_\lambda \int_0^{4\pi} I_\lambda(\hat{s}_i) \Phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s}) d\Omega_i \quad (22)$$

Donde (I_λ) es la intensidad de radiación espectral en la dirección (\hat{s}) en [$W/m^2 * nm * sr$], mientras que (κ_λ) y (σ_λ) son los coeficientes de absorción y dispersión, respectivamente con unidades de [m^{-1}]. (Φ_λ) es la función fase, una propiedad que contempla la probabilidad de que un fotón que viene de una dirección (Ω_i) se disperse hacia la dirección (Ω). Por otra parte, debido a que la fotosíntesis en microalgas se lleva a cabo a bajas temperaturas (menores a 200 °C), el término de emisión $j_\lambda^e(s)$ puede ser despreciado [24]. Por lo tanto, la Ec. (22) puede reescribirse de la siguiente manera:

$$\frac{dI_\lambda(\hat{s}, \Omega)}{ds} = -\beta_\lambda I_\lambda(\hat{s}, \Omega) + \frac{1}{4\pi} \sigma_\lambda \int_0^{4\pi} I_\lambda(\hat{s}_i) \Phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s}) d\Omega_i \quad (23)$$

Donde (β_λ) es el coeficiente de extinción y es igual a la suma de los coeficientes de absorción (κ_λ) y dispersión (σ_λ), es decir, es un parámetro que indica la probabilidad por metro recorrido (s) de que un fotón interactúe con una partícula en la dirección (Ω).

Si la Ec. (23) se divide entre (β_λ) se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{dI_\lambda(\hat{s}, \Omega)}{d\tau_\lambda} = -I_\lambda(\hat{s}, \Omega) + \frac{1}{4\pi} \omega_\lambda \int_0^{4\pi} I_\lambda(\hat{s}_i) \Phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s}) d\Omega_i \quad (24)$$

Donde (τ_λ) es la profundidad óptica o espesor óptico el cual es una medida de que tan transparente es el medio y proviene del producto de la longitud recorrida (s) por el coeficiente de extinción (β_λ); (ω_λ) es el albedo, parámetro que representa la fracción de luz dispersada, i.e., el cociente del coeficiente de dispersión (σ_λ) entre el coeficiente de extinción (β_λ) tal como se expresa en la siguiente ecuación [27].

$$\omega_\lambda = \frac{\sigma_\lambda}{\beta_\lambda} \quad (25)$$

Por otra parte, si la radiación local incidente es integrada en todas las direcciones se obtiene la irradiancia total (G_λ), definida como:

$$G_{\lambda}(x, y, z) = \int_{\Omega=0}^{\Omega=4\pi} I_{\lambda}(s, \Omega) d\Omega \quad (26)$$

Donde (G_{λ}), multiplicado por el coeficiente de absorción espectral (κ_{λ}), puede ser considerado como la tasa de absorción de energía local volumétrica para una longitud de onda específica (Local Volumetric Rate Energy Absortion, LVREA) [27].

$$LVREA_{\lambda}(x, y, z) = \kappa_{\lambda} G_{\lambda}(x, y, z) \quad (27)$$

Adicionalmente, la tasa total de absorción de fotones (Total Rate Photon Absortion, TRPA) puede ser obtenida mediante la integración de LVREA dentro del volumen del reactor, de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$TRPA = \iiint_V (LVREA) dV \quad (28)$$

Finalmente, la RTE dada por las ecuaciones (24) y (22) indica que los coeficientes de absorción (κ_{λ}) y dispersión (σ_{λ}) junto con la función de dispersión fase (Φ_{λ}), son parámetros principales necesarios para resolver la ecuación de transferencia de radiación y predecir por simulación la transferencia de intensidad de radiación en fotobiorreactores o estanques. Sin embargo, estas propiedades son fuertemente dependientes de la longitud de onda y difíciles de predecir mediante la teoría de ondas electromagnéticas dada la compleja morfología de los microorganismos y sus diversos cromóforos [5]. Sin embargo, pueden ser directamente medidas experimentalmente tal como se discutirá en secciones posteriores.

2.9.2. Características radiativas de microalgas

Las características radiativas de las microalgas han sido medidas experimentalmente o predichas teóricamente [17,19]. Es posible realizar mediciones experimentales directas en microorganismos de cualquier forma y tamaño. Sin embargo, la estimación de estos parámetros es uno de los procesos de estimación más intrincados [28] principalmente, debido a la necesidad de resolver una ecuación parcial integro diferencial de cinco dimensiones en cada paso del algoritmo de minimización. Además, la estimación paramétrica debe repetirse para un mismo tipo de microalga en diferentes condiciones de crecimiento, tales como diferentes cambios de pH, temperatura y / o densidad de flujo de fotones, al influir en el crecimiento de las microalgas a un nivel tan profundo que pueden alterar las propiedades radiativas de estas [20]. En los últimos años se han desarrollado métodos experimentales para determinar el transporte de energía por absorción y dispersión de microalgas. Los autores de estos trabajos se enfocaron en medir la reflectancia total (reflectancia difusa más reflectancia especular) y la transmitancia normal-hemisférica de microalgas en suspensión empleando un espectrofotómetro de doble esfera de integración y recuperar la energía absorbida y dispersada, usando el método de doble adición inversa (Inverse-adding-doubling, IAD) [21].

Los cultivos de microalgas presentaron una concentración entre $(1.1 \text{ y } 2.4) \times 10^{13}$ células/ m^3 . Este método no fue capaz de estimar con precisión los coeficientes de absorción y dispersión específicos especialmente para muestras con bajos coeficientes de absorción. Los autores declararon que, en muestras con bajos coeficientes de absorción y elevados coeficientes de dispersión, las pérdidas de intensidad no deseadas pueden ser interpretadas por el algoritmo IAD como fenómenos de absorción dentro de la muestra en lugar de pérdidas hacia el exterior, lo que conduce a una sobre estimación de coeficiente de absorción [29].

Por otra parte, existen trabajos en los cuales emplean un procedimiento experimental simple para estimar la absorción espectral promedio de suspensiones concentradas de microalgas, dicho método combina mediciones experimentales de la transmitancia normal hemisférica y la reflectancia de los microorganismos en suspensión en cubetas convencionales de espectrofotómetro empleando un algoritmo llamado método inverso y expresiones analíticas obtenidas de las modificaciones de la aproximación de dos flujos el cual toma en cuenta absorción y la dispersión múltiple. Dicho método fue válido con mediciones directas de la función fase de dispersión y de las secciones transversales de absorción y dispersión de la microalga *Chlorella vulgaris* [29]. El principal problema de este enfoque consiste en que las propiedades ópticas no han probado ser independientes de la geometría donde son estimadas, y no pueden ser utilizadas con confianza para el diseño y escalamiento de fotobiorreactores.

Alternativamente, las características radiativas de las microalgas pueden ser estimadas teóricamente usando teoría de ondas electromagnéticas y soluciones de las ecuaciones de Maxwell como la teoría de Lorenz-Mie. Sin embargo, tales predicciones teóricas se basan en tratar las células como homogéneas y esféricas con algún índice de refracción espectral complejo efectivo basado en modelos simplificados [17,19]. Por ejemplo, colonias fractales, aglomerados de microalgas, cianobacterias en forma de mancuerna *Synechocystis sp.* no pueden ser tratadas como esféricas. Por el contrario, ya existen métodos experimentales que pueden determinar la absorción de microorganismos con cualquier forma arbitraria [30].

2.9.3. Investigaciones previas (determinación experimental de propiedades ópticas en microalgas)

Las propiedades radiativas de partículas pueden ser estimadas de forma teórica o experimental. La estimación teórica proporciona una mejor comprensión de la influencia de la morfología y las constantes ópticas de las partículas y las propiedades radiativas del medio. Lo cual genera puntos de partida hacia el diseño de nuevos materiales con propiedades personalizadas. Por el contrario, la determinación experimental proporciona el conocimiento real de las propiedades de las partículas. La identificación también puede usarse como un medio para verificar la validez de la elección del modelo de predicción de las propiedades de las partículas. Sin embargo, debido a la cantidad de parámetros involucrados, probablemente la estimación de propiedades radiativas se encuentre en los procesos de identificación más complejos [28].

La determinación experimental de las propiedades radiativas es un enfoque iterativo que requiere elecciones apropiadas de:

- (i) Un modelo directo de transferencia radiativa y un modelo de solución relacionado, por ejemplo, obtener la solución de la RTE por algún método numérico, o por ecuaciones de transporte simplificadas que puedan resolverse mediante métodos semi analíticos.
- (ii) Una configuración experimental adecuada.
- (iii) Un conjunto de parámetros a identificar / predecir teóricamente y de una secuencia de operación.
- (iv) Un algoritmo de optimización.

Los pasos (i) y (ii) claramente no son independientes. Tomar elecciones correctas es esencial para una buena estrategia de estimación. Las técnicas experimentales disponibles para la identificación de las propiedades radiativas consiste en mediciones espectrales y direccionales de reflectancia y o transmitancia [28]. Las configuraciones experimentales que se han utilizado en la estimación de propiedades ópticas de partículas en suspensión se enlistan a continuación y se representan esquemáticamente en la Figura 9.

- a) Haz colimado que incide en dirección normal a la muestra, se llevan a cabo mediciones de transmitancia bidireccional y reflectancia.
- b) Haz colimado con diferentes ángulos de incidencia sobre la muestra, se hacen a cabo mediciones de transmitancia hemisférica; reflectancia hemisférica y también es posible para una dirección de incidencia casi normal.
- c) Radiación difusa sobre la muestra, medición de transmitancia bidireccional y reflectancia.
- d) Mediciones de flujo radiativo bidireccional emitido por una muestra caliente (auto emisión).

Es importante mencionar que en el caso b la configuración experimental cuenta con una esfera integradora. Esta esfera es un componente óptico que consiste en una cavidad esférica hueca con su interior cubierto con una capa reflectante blanca difusa y con pequeños orificios para los puertos de entrada y salida en el que la dirección de incidencia se fija normal o con diferentes ángulos de incidencia sobre la muestra. Las mediciones hemisféricas direccionales son bastante simples y más rápidas de adquirir que las bidireccionales [28].

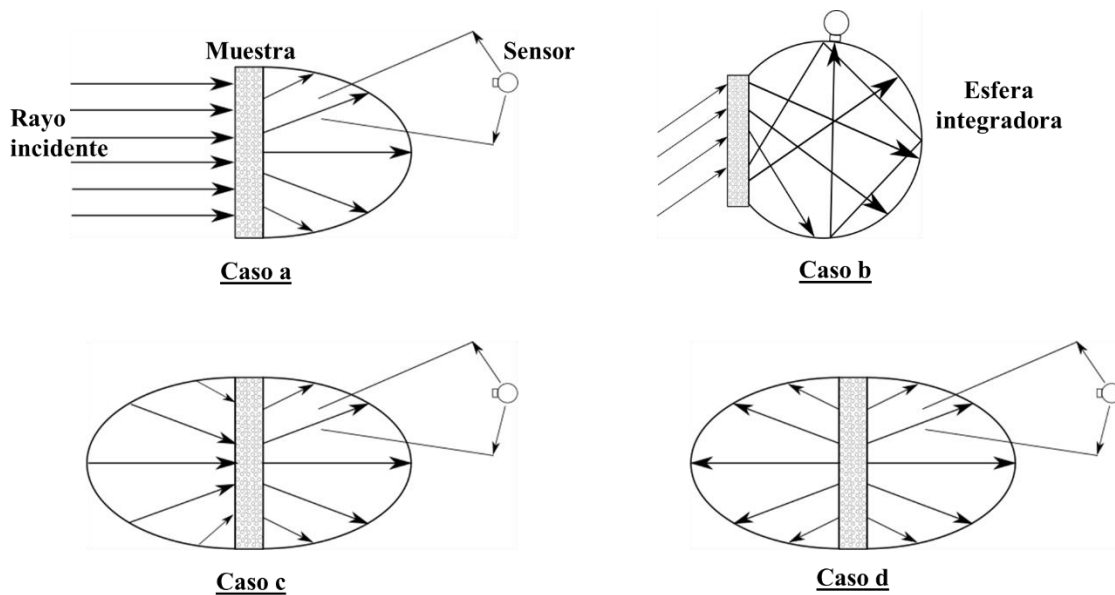


Fig. 9 Diferentes configuraciones experimentales para la estimación de propiedades ópticas [28].

En la literatura existen diversos trabajos en relación a la determinación experimental de propiedades ópticas de microalgas en los cuales emplean configuraciones y criterios como los antes mencionados. Por ejemplo, Laurent Pilon et al. en 2011[3] emplean un método experimental para determinar las características radiativas de las microalgas haciendo uso de la configuración experimental reportada por Berberoglu et al. [25]. Para determinar la función fase de dispersión de los microorganismos emplean un nefelómetro que contiene un detector con un pequeño ángulo de aceptación que puede medir la radiación dispersa como una función de los ángulos polares y azimutales.

Para la determinación del coeficiente de absorción hacen uso de una configuración experimental (Figura 10a) en la cual hacen incidir un haz de luz a través de una muestra colocada a lado de una esfera integradora que contiene un detector que se encarga de medir la transmitancia hemisférica-normal [3]. Además, también es posible medir la reflectancia hemisférica-normal haciendo incidir un haz de luz en la entrada de la esfera y colocando una muestra en el puerto de salida de la esfera integradora (Figura 10b) [28].

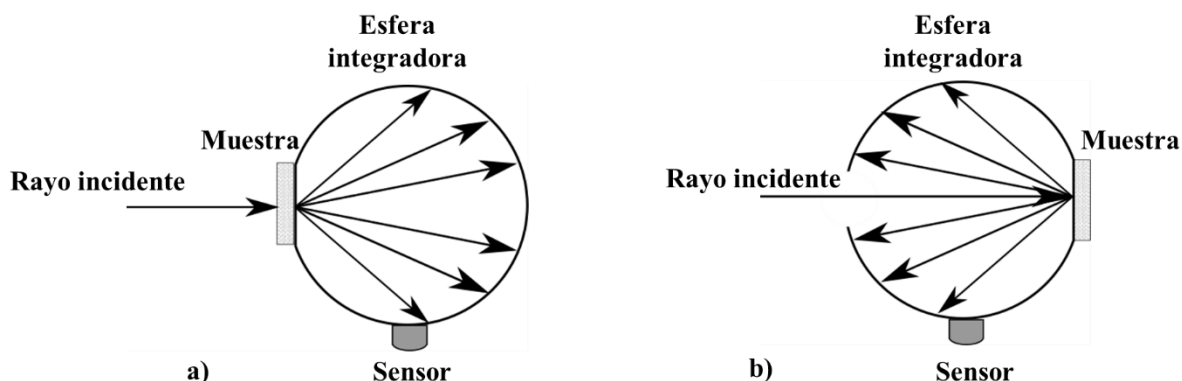


Fig. 10 Configuración experimental para determinación experimental del coeficiente de absorción (a) y dispersión usando una esfera integradora (b) [3][28].

En 2013 Kathryn Hannis et al.[31]. Utilizaron configuraciones experimentales propuestas en trabajos previos para determinar las propiedades ópticas de 5 diferentes tipos de microalgas. La estimación del coeficiente de absorción fue realizada con el sistema experimental propuesto por Laurent Pilon et al. [3]. Para la medición de energía dispersada y transmitida utilizaron el sistema experimental representado en la Figura 11, en la que se muestra la trayectoria de un haz de referencia y la de un haz que se propaga a través de la muestra de microalgas (haz muestra) para la medición de la absorbancia. Ambas trayectorias son muy similares; ambas terminan dentro de la esfera integradora. La trayectoria del haz muestra se propaga a través de tres cubetas de espectrofotómetro marcadas con los números 1,2 y 3 en la figura 11. Las cubetas 1 y 2, se ubican fuera de la esfera integradora mientras que la cubeta número 3 se coloca dentro de la esfera integradora. La lente y los espejos dan forma al haz muestra para que se propague sin obstáculos a través de las cubetas de espectrofotómetro. Por lo tanto, es posible realizar dos mediciones con la cubeta fuera de la esfera integradora y una tercera con la cubeta número 3 dentro de la esfera integradora (el caso en el que se coloca la cubeta número 3 no fue estudiado).

El objetivo de la configuración experimental descrita anteriormente es separar la energía transmitida de la energía dispersada hacia enfrente por lo que primero se mide la energía transmitida incluyendo la dispersada hacia enfrente colocando solo la cubeta número 2 con microalgas , después se coloca solo la cubeta de espectrofotómetro número 1 a una determinada distancia del puerto de entrada de una esfera integradora con el fin de que solo la energía transmitida ingresara a la esfera integradora y de esta manera sea posible separar la energía transmitida de la dispersada [31].

Por otra parte, en 2016 Kandilian et al. [4]. Desarrollo un método experimental para determinar la absorción espectral de microalgas sobre la región fotosintética activa en la que combina mediciones experimentales de transmitancia hemisférica-normal al igual que de reflectancia realizadas en suspensiones de microalgas colocadas en cubetas convencionales de espectrofotómetro.

El sistema experimental empleado fue el reportado por Berberoglu et al. [25], en el que emplearon un nefelómetro equipado con un láser He-Ne (Helio-neón) para estimar la función fase de dispersión del cultivo de microalgas y una esfera integradora para obtener las mediciones de transmitancia mencionadas anteriormente. Además, aplicaron un algoritmo llamado método inverso y expresiones analíticas obtenidas de la aproximación de dos flujos modificada para explicar la absorción y dispersión múltiple.

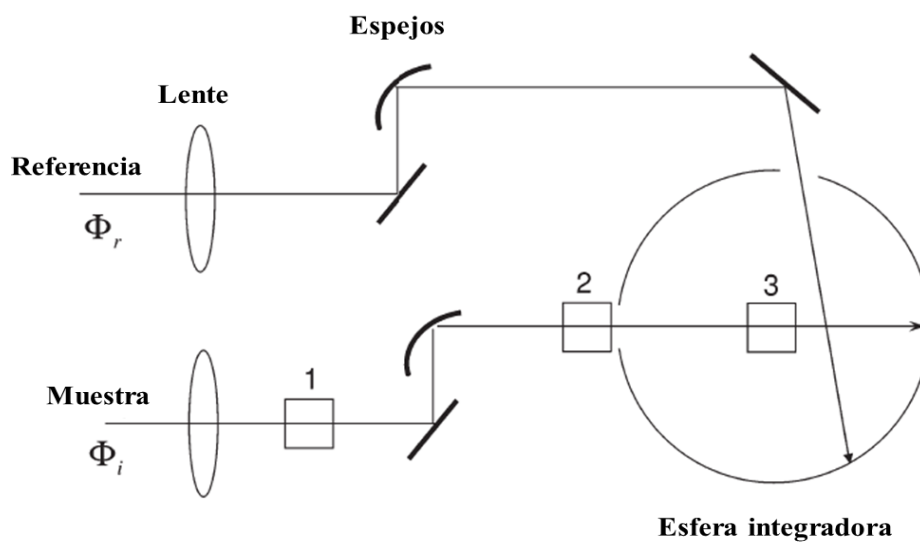


Fig. 11 Configuración experimental para medición de energía dispersada y transmitida. El número 1 representa la posición normal de la cubeta contendrá de muestra de microalgas, el número 2 representa la posición de la cubeta enfrente de la entrada de la esfera integradora y el número 3 la posición de la cubeta dentro de la esfera integradora (la cual no fue empleada en el estudio) [32].

Los métodos para la estimación de las propiedades ópticas de microalgas descritos anteriormente hacen uso de sistemas experimentales similares en los que emplean diferentes equipos y configuraciones experimentales para ser capaces de medir las diferentes cantidades de energía involucradas en el sistema, tales como la cantidad de energía transmitida, reflejada y dispersada hacia enfrente. Sin embargo, una de las deficiencias que tienen estas configuraciones experimentales es que no consideran la energía dispersada de forma lateral provocada por la interacción de los fotones con el cultivo de microalgas dentro de las cubetas de espectrofotómetro. Además, utilizar diferentes sistemas para estimación cada una de las propiedades ópticas provoca mayor consumo de tiempo experimental.

3. JUSTIFICACIÓN, HIPÓTESIS Y OBJETIVOS

3.1. Justificación

Dada la crucial importancia de la descripción de la transferencia de radiación en el modelado de fotobiorreactores, es esencial tener conocimiento de las propiedades ópticas del cultivo de microalgas. Sin embargo, estas propiedades no han sido determinadas de una forma robusta que permita mostrar independencia de la concentración de biomasa o de la geometría de los sistemas donde son estimadas. Además, debido a que estas ópticas pueden cambiar por las condiciones a las que están expuestos los sistemas de cultivo es necesario tener una metodología que permita estimar de manera independiente, rápida y eficiente las propiedades ópticas. Por lo tanto, es de vital importancia desarrollar una metodología que cumpla con estas características, y así mejorar la estimación de las propiedades radiativas que son parámetros esenciales para resolver la ecuación de transferencia de radiación y como resultado poder describir la transferencia de radiación en fotobiorreactores, y de esta manera poder mejorar los modelos de estimación de producción de biomasa que llevaría a mejorar el escalamiento de fotobiorreactores para el cultivo de microalgas.

3.2. Hipótesis

El uso de un modelo radiativo riguroso y de un sistema experimental con geometría esférica a bajas concentraciones de biomasa, permitirá estimar de manera independiente los parámetros espectrales de transporte radiativo de un cultivo de microalgas.

3.3. Objetivos

3.3.1. Objetivo general.

Desarrollar un sistema experimental y una metodología que permita estimar las propiedades ópticas de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 a partir de la caracterización de los fenómenos de transporte radiativo del sistema.

3.3.2. Objetivos particulares.

- Diseñar y construir los sistemas experimentales que permitan la medición de las diferentes variables macroscópicas observables (intensidad de radiación de entrada, transmitida y dispersada total) en el sistema.
- Poner a punto la metodología y sistemas experimentales para estimar las propiedades ópticas de la microalga de estudio empleando la ecuación de Beer-Lambert y el método de Monte Carlo Ray Trace.

4. MATERIALES Y MÉTODOS.

A continuación, se describen las técnicas analíticas que se utilizaron de manera general para alcanzar los objetivos planteados. En cada sección referente a resultados experimentales se presentará los materiales y métodos relacionados con los experimentos específicos.

4.1. Inóculo.

Se utilizó la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714, la cual es una microalga unicelular con forma esférica de 1-6 μm de diámetro. Esta especie particular de microalgas verdes, tiene una gran productividad de biomasa y su tiempo de duplicación celular relativamente corto. Además, es una fuente importante para la producción comercial de carotenoides y diversos biofarmacéuticos y también puede producir lípidos para la producción de biodiesel [4]. La cepa del género *Chlorella* utilizada en el presente proyecto de investigación, proviene de la colección de Cultivos de Algas de la Universidad de Texas, campus Austin (Culture Collection of Algae at the University of Texas at Austin).

Esta cepa es cultivada en una botella de 2 litros con medio de cultivo Bayfolan Forte Bayer (Tabla 2), a una temperatura de 26 ± 1 °C, a un pH alrededor de 7 y con una iluminación de luz de 1000-1500 $\mu\text{mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$ proveniente de una lámpara LED de 10 W marca MEGAMEX modelo MLED10, la iluminación se llevó a cabo en ciclos de luz / oscuridad de 12:12 h. El cultivo se alimentó con un flujo de aire proveniente de una bomba de aire (Elite 802), pasando por un filtro (jeringa filtro estéril de 50 mm de diámetro con una membrana de PTFE con un tamaño de poro de 0.2 μm), el aire fue humidificado con agua destilada a través de un matraz Kitasato de 500 mL llegando a través de un tubo con distribuidor de aire de acero inoxidable tal como se ilustra en la Figura 12.

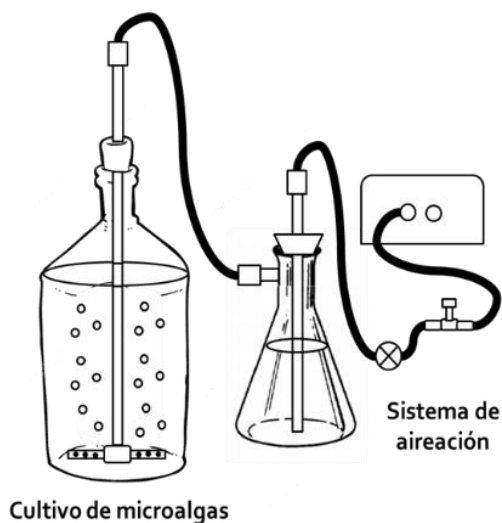


Fig. 12 Representación esquemática del sistema de aireación para el cultivo de microalgas.

4.2. Medio de cultivo.

El medio de cultivo constituye el aporte de nutrientes indispensables para el crecimiento de los microorganismos. La composición precisa depende de la especie que se quiera cultivar, debido a que las necesidades nutricionales varían considerablemente.

El medio de cultivo utilizado en este trabajo fue Bayfolan forte líquido, el cual es una fórmula concentrada de nutrimentos que contiene vitaminas y fitohormonas; actúa estimulando los procesos metabólicos de las plantas o microorganismos, vigorizándolas al proporcionarles los nutrimentos indispensables para su buen desarrollo.

Modo de preparación para el cultivo de microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714. Se pesó 1.05 gr del medio de cultivo Bayfolan forte en una balanza analítica (OHAUS Discovery) para agregarlo a un 1 litro de agua desionizada contenida en un matraz aforado con capacidad de 1 L. Después de mezclar correctamente se transvaso a una botella de vidrio de 1 litro y se midió el pH de la solución, el cual debe estar entre 7-8. Finalmente se etiquetó la botella y se colocó en el refrigerador a una temperatura de 6 °C.

Reactivo	% En peso / peso
Nitrógeno total (N)	11.470
Potasio (K ₂ O)	6.000
Boro (B)	0.036
Cobre (Cu)	0.040
Fierro (Fe)	0.50
Molibdeno (Mo)	0.005
Zinc (Zn)	0.080
Clorhidrato de tiamina	0.004
Fósforo (P ₂ O ₅)	8.000
Azufre (S)	0.230
Calcio (Ca)	0.025
Cobalto (Co)	0.002
Manganeso (Mn)	0.036
Magnesio (Mg)	0.025
Ácido indol acético	0.003

Tabla 2 Composición del medio de cultivo Bayfolan forte.

4.3. Técnicas analíticas

4.3.1. Concentración de biomasa mediante peso seco.

La concentración de biomasa microalgal en el medio de cultivo se determinó empleando el método de peso seco. Para lo cual se filtraron diluciones a diferentes porcentajes en volumen (0, 4, 8, 12 y 16 %) de solución de microalgas, usando un matraz Kitasato de 500 mL conectado a una bomba de vacío, en filtros de 0.45 μm de tamaño de poro. Los cuales fueron previamente llevados a peso seco y pesados. Posteriormente los filtros que contenían la biomasa microalgal de las diferentes diluciones se colocaron en un horno a 80°C y cada 1.5 h se pesaban de nuevo hasta registrar un peso constante. La cantidad de biomasa es obtenida mediante la diferencia del filtro con biomasa menos el filtro seco sin biomasa microalgal.

4.3.2. Concentración de biomasa mediante conteo celular.

La concentración de biomasa microalgal también fue determinada por el método de conteo celular. Para lo cual se realizaron diluciones a diferentes porcentajes en volumen (0, 4, 8, 12 y 16 %) de solución de microalgas en matraces aforados de 10 mL, de cada dilución se tomó una muestra de 1 μL y se colocó en la cámara de Neubauer de 0.0025 mm^2 de la marca BLAU BRAND, la cual fue observada en un microscopio óptico LEICA ICC500/DM500 con un objetivo de (40x / 0.65). Se contaron todas las células presentes en 5 cuadros del cuadrante central de la reglilla para obtener el número de células presentes en cada muestra

Los resultados de las técnicas analíticas descritas anteriormente se emplearon para la elaboración de la curva patrón de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 la cual sirve para estimar la concentración de una muestra del cultivo en función de la medición de su absorbancia. (Apéndice A).

4.4. Metodología para la determinación de propiedades ópticas de *Chlorella vulgaris* UTEX 2714

4.4.1. Sistema experimental para determinación del coeficiente de extinción (β)

El sistema experimental usado para la estimación del coeficiente de extinción del cultivo de microalgas en suspensión, está constituido por una fuente de luz artificial tipo LED de potencia 1 [W] de luz blanca pura (marca: Siled, modelo: LED-P3W200-120/41) dotado con un disipador de calor (marca: Siled, modelo: LED-Disipador-3W) con dimensiones de 53 [mm] de largo y 22 [mm] de ancho para evitar un calentamiento excesivo en el LED, una bomba peristáltica con flujo de 100 [mL / min] (marca: InterLab) , un micro fotobiorreactor de 10 [cm] de longitud, 2 [cm] de diámetro y capacidad de 30 [mL] de material de vidrio Pyrex , dos colimadores de material NYLOMAQ negro de 15 [cm] de longitud y 6 [mm] de diámetro, el colimador número 1 situado en una base adaptada al disipador de calor y el segundo colocado al otro extremo del micro fotobiorreactor, tal como se ilustra en la Figura 13. Finalmente, el sistema cuenta con sensor óptico con cable de fibra óptica de 2 [m] de longitud (marca: StellarNet Inc, modelo: F600-UVVIS-SR) colocado al extremo del segundo colimador y conectado a un espectroradiómetro (marca: StellarNet Inc, modelo: Black-Comet C-50). Este sistema experimental está basado en una investigación previa del área de fotocatalisis de la Universidad Autónoma Metropolitana [33]. El sistema experimental se colocó dentro de un gabinete de madera de 120 [cm] de longitud, 60 [cm] de profundidad y 90 [cm] de alto, el interior y exterior del gabinete fue recubierto con esmalte negro mate.

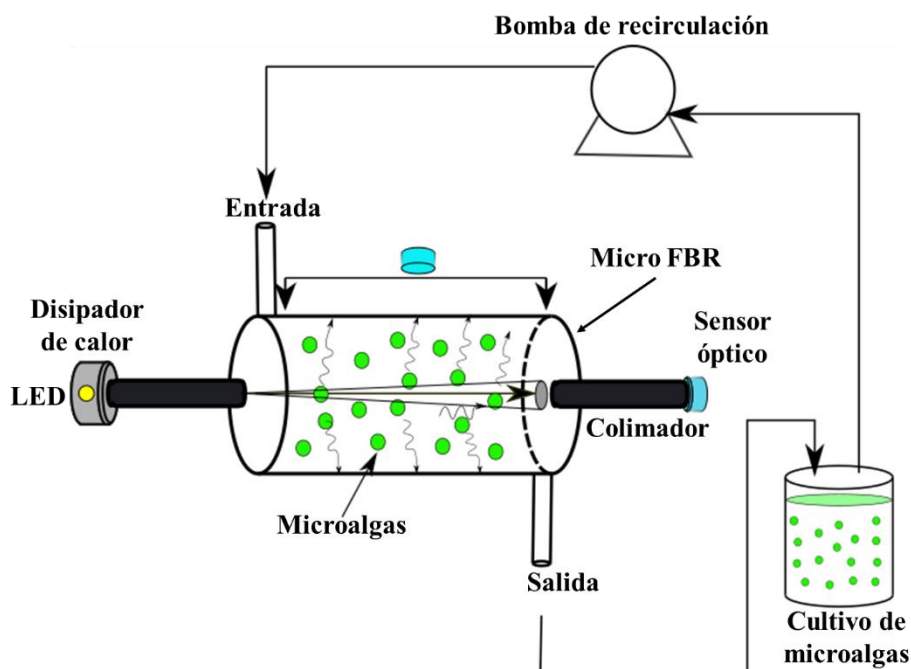


Fig. 13 Representación esquemática del sistema experimental para determinación de propiedades ópticas.

4.4.2. Determinación experimental del coeficiente de extinción (β)

El coeficiente de extinción (β_{λ}^*) y (β_{λ}) de la microalga en suspensión *Chlorella vulgaris* UTEX 2714, se determinó en un intervalo de longitud de onda de 400-750 [nm] (intervalo en el cual los aparatos fotosintéticos de estos microorganismos son activados). El sistema experimental empleado para determinar esta propiedad óptica fue el sistema mostrado en la figura 13.

Para dar inicio a la corrida experimental se alineo correctamente el micro fotobiorreactor con los colimadores, se recirculo 65 mL de medio de cultivo Bayfolan a través del micro fotobiorreactor con ayuda de una bomba peristáltica, una vez que el medio de cultivo se encontraba en recirculación se encendió el LED de potencia para generar un haz de luz que se propago a través del primer colimador, micro fotobiorreactor y hasta el final segundo colimador donde con ayuda del sensor óptico se registró el valor de la intensidad de radiación transmitida definida como (I_0) con un valor de 3.30 [W/m²]. En esta medición la concentración de microalgas en suspensión fue igual a cero. Por lo tanto, los fotones emitidos por el LED que lograban recorrer el medio de cultivo libremente hasta llegar a la cara del sensor óptico indicaban la cantidad de intensidad de radiación por metro cuadrado recibida. Una vez registrado el (I_0), se tomó 16.25 mL de inóculo con ayuda de una micropipeta (marca: Transferpette, modelo: 07M24759) y se vertió dentro del recipiente que contenía el medio de cultivo recirculante. Para lograr que la solución de microalgas fuera homogénea se dejó recircular durante un periodo de 3-5 min. Una vez pasado este periodo de tiempo se registró la medida de intensidad de radiación transmitida a través del cultivo de microalgas definida como (I). Después de la primera medición de (I), se procedió a diluir la solución recirculante para lograr obtener una menor concentración de microalgas en suspensión a la inicial (concentración máxima).

El procedimiento anteriormente descrito se realizó a 5 diferentes concentraciones de microalgas (5.19 ,10.10,16.70, 22.17 y 22.50 g/m³). Las mediciones de (I_0) e (I) a diferentes concentraciones fueron realizadas dentro del gabinete negro a puertas cerradas, con el fin de evitar cualquier perturbación de intensidad de radiación incidente por algún otro medio. Los experimentos se realizaron por duplicado para mostrar reproducibilidad y buen funcionamiento del sistema de determinación de propiedades ópticas.

Una vez realizadas las mediciones experimentales de la intensidad de radiación transmitida a través del micro fotobiorreactor con y sin microalgas en suspensión definidas como (I_0) e (I) respectivamente, se utilizó la siguiente ecuación para el tratamiento de datos:

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\beta^* \cdot [Cb] \cdot l} \quad (29)$$

La Ec. (29) es conocida como la Ley de Beer-Lamber, la cual es usualmente empleada durante el cultivo de microalgas para estimar la distribución de intensidad de radiación, esta ley asume una caída exponencial de la intensidad de radiación desde la superficie externa del sistema de cultivo [22]. Donde (l) es la distancia que recorren los fotones desde la superficie externa del sistema a la posición bajo consideración (en este caso en específico al final de colimador 2), (β^*) es el coeficiente de extinción específico, y [C_b] es la concentración de microalgas en suspensión.

De la Ec. (29) es posible obtener una expresión para el cálculo del coeficiente de extinción tal como:

$$\beta^* = -\frac{\ln(I/I_0)}{[C_b] \cdot l} \quad (30)$$

Para aplicar la ley de Beer-Lamber, se consideró que el cultivo de microalgas está perfectamente mezclado e isotropía en el sistema (las propiedades ópticas de los microorganismos en suspensión son independientes de la dirección de la intensidad de radiación) [24]. Los resultados se obtuvieron utilizando tanto los valores promedio como espectrales (en el intervalo de 400-700 nm) de la intensidad de radiación (I_0) e (I).

Por otra parte, se realizó este procedimiento utilizando un sistema de geométrica esférica (descrito en la siguiente sección) para comprobar si la estimación del coeficiente de extinción era dependiente de la geometría del sistema donde se determina. Los resultados mostraron que la estimación de esta propiedad óptica es independiente de la geometría del sistema ya que se obtuvieron resultados prácticamente iguales.

Finalmente, los resultados obtenidos utilizando diferentes geometrías permitieron realizar el cambio del micro fotobiorreactor cilíndrico a esférico para la determinación del albedo (ω) (reflectancia por las microalgas) y el parámetro de asimetría (g) de la función de fase (Φ) de Henyey-Greenstein. Además, el uso de un sistema con geometría esférica permitió realizar mediciones de la energía dispersada por el cultivo de microalgas de una manera más sencilla en comparación con el sistema cilíndrico en el que la medición de la energía dispersada cerca de las partes planas (tapas) del micro fotobiorreactor era complicada, lo que provoca tener una mayor incertidumbre al momento de realizar la medición en esas partes del sistema.

4.4.3. Sistema experimental para determinación de albedo (ω) y parámetro de asimetría (g)

El sistema experimental empleado para estimar el albedo (ω) (reflectancia de la partícula) y el parámetro de asimetría (g) de la función fase de Henyey-Greenstein (Φ) del cultivo de microalgas en suspensión está constituido por una fuente de luz artificial tipo LED de potencia de 1 [W] de luz blanca pura (marca: Siled, modelo: LED-P3W200-120/41) dotado con un disipador de calor (marca: Siled, modelo: LED-Disipador-3W) con dimensiones de 53 [mm] de largo y 22 [mm] de ancho para evitar un calentamiento excesivo en el LED, un matraz esférico de vidrio Pyrex con dimensiones de 4.12 [cm] de radio, 27 [cm] de circunferencia y capacidad de 260 mL un colimador de material NYLOMAQ negro de 15 [cm] de longitud y 6 [mm] de diámetro, un agitador magnético de 2 [cm] de longitud, una parrilla de agitación magnética (marca: Ciblanc). Finalmente, el sistema cuenta con sensor óptico con cable de fibra óptica de 2 [m] de longitud (marca: StellarNet Inc, modelo: F600-UVVIS-SR) conectado a un espectroradiómetro (marca: StellarNet Inc, modelo: Black-Comet C-50). El sistema experimental se representa esquemáticamente en la Figura 14.

El sistema experimental se colocó dentro de un gabinete de madera de 120 [cm] de longitud, 60 [cm] de profundidad y 90 [cm] de alto, el interior y exterior del gabinete fue recubierto con esmalte negro mate.

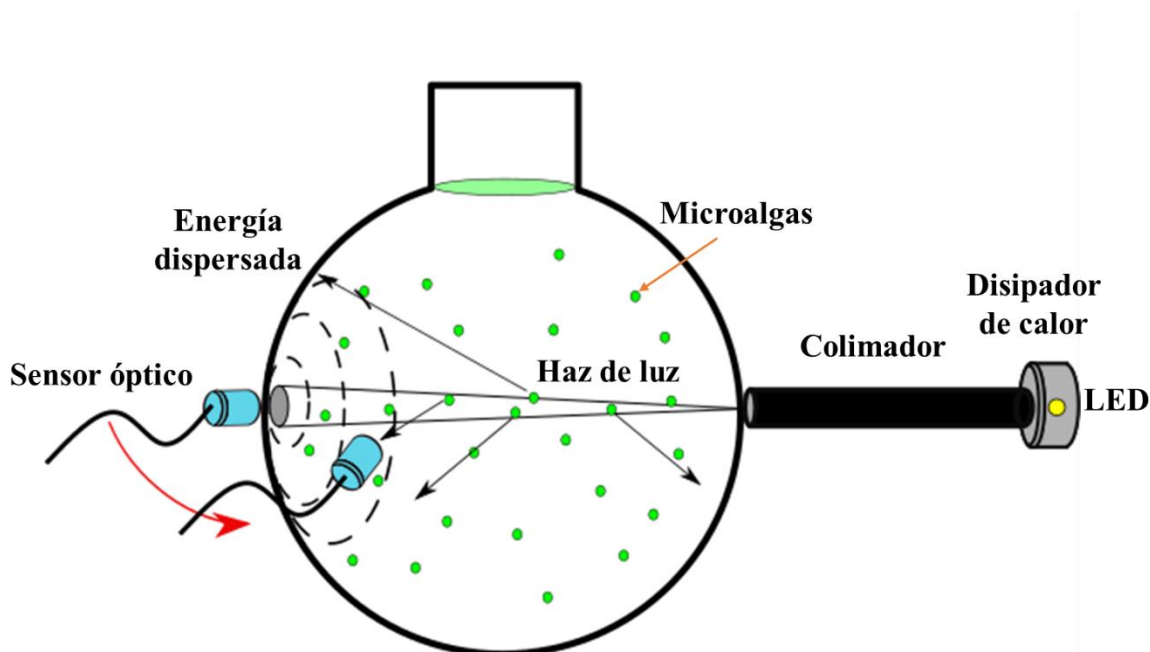


Fig. 14 Sistema experimental con geometría esférica para la determinación del albedo y parámetro de asimetría (g) del cultivo de microalgas.

4.4.4. Definición del porcentaje de energía dispersada (ϕ)

Para la estimación del albedo (reflectancia de la partícula) del cultivo de microalgas en suspensión es necesario realizar un análisis en relación a la densidad óptica del medio (microorganismos en suspensión) Ec. (12) y al posible número de interacciones de los fotones con las microalgas dentro del cultivo; lo que lleva a obtener una idea general de que porcentaje de energía sale del sistema y que porcentaje de energía interactúa más de una vez. De esa manera obtener una variable experimental en función de cantidades de energía que sean fáciles y rápidas de medir.

Retomando la Ec. (29) de la siguiente forma:

$$\frac{I_0}{I_b} = e^{-\tau} \quad (31)$$

Donde:

$$\tau = (\beta \cdot l)$$

$$\beta = (\beta^*) \cdot [Cb]$$

Por ejemplo, para el caso en el cual $\tau \leq 0.1$

$$\frac{I_0}{I_b} = e^{-\tau} \geq 91\% \quad (32)$$

La Ec. (32) indica que la atenuación en el sistema es baja, lo que indica que la energía que entra al sistema (haz de luz entrante) es uniforme, por consiguiente, se puede aproximar como una fuente de radiación lineal de intensidad constante (con respecto al espacio).

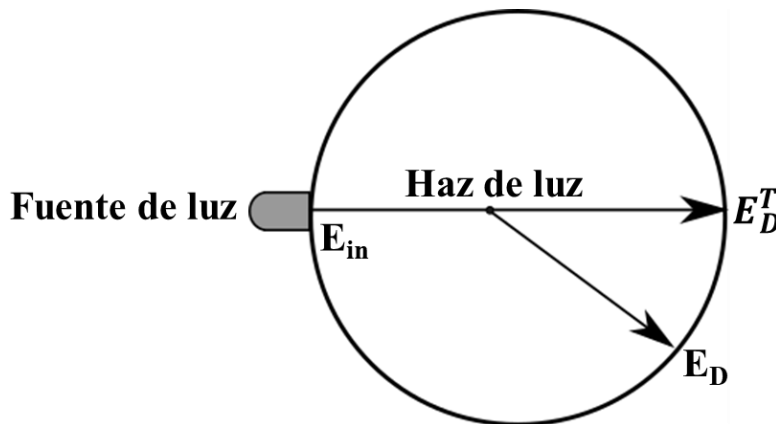


Fig. 15 Representación esquemática del fenómeno de dispersión gobernado por una sola interacción entre los fotones con las partículas Energía de entrada (E_{in}), Energía dispersada hacia enfrente más transmitida (E_D^T) y energía dispersada (E_D).

Partiendo de cualquier punto sobre el haz de luz entrante, hacia la frontera, es posible asumir que el valor medio de $\tau_i \leq \frac{1}{2}\tau$. Esto implica que aproximadamente el 95% de la energía que interactuó una vez con una partícula ($e^{-\frac{1}{2}\tau}$), sale del sistema sin interactuar de nuevo con una partícula. Es decir, solo el 0.45% (i.e., el 5% del 9%) de la energía “interactúa” más de una vez con los microorganismos en suspensión (sólo si el valor del $\omega = 1$, si $\omega < 1$ este porcentaje es aún menor).

Por otra parte, también es necesario realizar un análisis de las cantidades de energía que interactúan en el sistema experimental (Fig. 9) tales como: Energía entrada (E_{in}), Energía de salida (E_{out}), Energía dispersada lateral (E_D^S) y Energía dispersada frontal (E_D^F).

Se asume que, para concentraciones suficientemente bajas, el fenómeno de dispersión es gobernado por un solo evento de scattering; i.e., una vez que un fotón es desviado de su trayectoria original, un segundo cambio de trayectoria es mucho menos probable (dada la geometría y rangos de densidad óptica en que se trabaja dentro del sistema). Por lo tanto, para una sola interacción es válido asumir que:

$$\omega = \frac{\sigma}{\sigma + \kappa} \approx \frac{E_D^T}{E_D^T + E_A} \quad (33)$$

Donde la energía dispersada total (E_D^T) es la suma de la energía dispersada lateral y frontal, las cuales son cantidades medibles experimentalmente.

$$E_D^T = E_D^S + E_D^F \quad (34)$$

Es importante mencionar que la energía absorbida (E_A), es una cantidad que no puede ser medida directamente pero puede ser estimada de un balance de radiación macroscópico sobre el sistema esférico.

$$E_A = E_{in} - E_{out} \quad (35)$$

Donde (E_{in}) es la energía que entra al sistema y (E_{out}) es la energía que sale del sistema la cual se define como:

$$E_{out} = E_T + E_D^T \quad (36)$$

En este sentido la Ec. (33) llega a ser una función de cantidades medibles, como se muestra en la siguiente expresión:

$$\omega = \frac{\sigma}{\sigma + \kappa} \approx \frac{E_D^T}{E_{in} - E_T} \quad (37)$$

E_{in} y E_T son la energía que entra al sistema y la que se transmite a través del mismo, respectivamente. Considerando lo anterior, es posible asumir que la diferencia entre ellas ($E_{in} - E_T$) es la cantidad de energía radiativa que interactúa con las microalgas en suspensión.

Sin embargo, dado que la Ec. (33) no siempre es válida, es necesario definir una nueva variable que exprese el porcentaje de energía dispersada por el cultivo de microalgas (φ), tal como se expresa en la siguiente ecuación:

$$\varphi = \frac{E_D^T}{E_{in} - E_T} = f(\omega) \quad (38)$$

Cuando la dispersión hacia atrás o “Backwards scattering” es baja, debería haber una relación lineal entre el albedo (ω) y el porcentaje de energía dispersada (φ). Sin embargo, esto no es necesariamente cierto para valores moderados de (τ) y para ciertas funciones de fase. En la práctica esta función se obtiene de ajustes de datos experimentales. Lo importante aquí es que esta función no depende de la función de fase; es decir, la estimación del albedo debería ser independiente de la función de fase considerando una densidad óptica de baja a moderada y una metodología experimental basada en las variables definidas anteriormente: la energía entrante, total dispersada y transmitida.

Con el fin de sustentar la hipótesis establecida acerca de la relación lineal entre (φ) y el (ω) se realizaron simulaciones computacionales empleando el método de Monte Carlo Ray Trace (MCRT), con el objetivo de observar el efecto que tiene el incremento o decremento del coeficiente de extinción (emplear altas o bajas concentraciones de biomasa) y albedo en (φ). Además, en estas simulaciones se observó en que intervalo de concentraciones de biomasa y el porcentaje de energía dispersada (φ) tiene una relación lineal con el albedo (ω) e independencia de la función fase (g), tal como se supone al momento de definir la variable (φ). Por otra parte, trabajos realizados por Ramos Huerta et al. [33] en el área de fotocatalisis muestran resultados donde a concentraciones bajas de catalizador ($\tau \leq 1$) el porcentaje de energía dispersada (φ) es independiente la función de fase.

Los gráficos de las simulaciones computacionales se presentan en la sección de resultados del presente trabajo. Cabe resultar que en este trabajo se empleó una geometría esférica a diferencia de la geometría cilíndrica empleada por Ramos Huerta et al. [33]. Sin embargo, el comportamiento en ambos sistemas fue muy similar.

4.4.5. Determinación del albedo promedio y espectral a partir del porcentaje de energía dispersada (φ)

El porcentaje de energía dispersada (φ) para la estimación de la reflectancia (albedo) del cultivo de microalgas en suspensión *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 fue determinada al igual que el coeficiente de extinción, en un intervalo de longitud de onda de 400-750 [nm] y a temperatura ambiente de 25 °C aproximadamente. El sistema experimental utilizado para determinar esta propiedad óptica fue el sistema mostrado en la figura 14. En el que la fuente de luz artificial emitida por un LED fue colimada a través del colimador (1) de 15 cm de longitud situado inmediatamente después del LED, como se puede ver en la figura 14. El haz de luz se propaga a través del colimador e incidió paralelamente sobre la superficie del recipiente esférico que contenía 260 mL de cultivo de microalgas.

Se realizaron 12 mediciones de energía dispersada en diferentes puntos de la circunferencia del recipiente esférico. La primera medición fue realizada en el extremo opuesto del haz incidente, punto donde el haz de luz se proyectaba, en este punto se midió la energía transmitida y dispersada hacia enfrente. Después, se realizaron 11 mediciones sobre la superficie del recipiente esférico, cada punto de medición fue equidistante el uno del otro. Las mediciones de energía dispersada se realizaron a 3 diferentes porcentajes en volumen de microalgas (1, 2 y 3 %) con relación a la cantidad de medio de cultivo utilizado equivalentes a concentraciones de (6.2, 7 y 7.4 g/m³). Cada corrida experimental se realizó dentro de un gabinete negro a puertas cerradas con el fin de evitar cualquier perturbación de energía luminosa incidente ajeno al experimento (e.g., energía emitida por lámparas de laboratorio, equipos, luz natural, etc.). Los experimentos se realizaron por duplicado para mostrar reproducibilidad y buen funcionamiento del sistema de determinación del albedo.

Para la determinación del albedo promedio de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 se emplearon los resultados experimentales de (β) y (φ) promedios, obtenidos con la metodología descrita en las secciones (4.4.2 y 4.4.5) y tomando en cuenta las consideraciones descritas en los puntos anteriores para así integrarlas en las simulaciones del método de MCRT.

Con el fin de conocer la concentración de microalgas en la que existe una relación aproximadamente lineal entre el porcentaje de radiación dispersada (φ) y el albedo (ω) fue necesario recurrir a simulaciones computacionales empleando el método de MCRT en el cual se emplearon valores experimentales de (β) iguales a 0, 0.18, 0.25, 0.43 y 0.54 [1/cm] y del parámetro de asimetría (g) con valores de [-1 a 1]. Los resultados de estas simulaciones

pueden verse en (apéndice B). Estos resultados mostraron que mientras el valor del coeficiente de extinción (β) decrece, el porcentaje de energía dispersada (φ) y el albedo (ω) presentan una relación aproximadamente lineal e independencia del valor de (g). Concluyendo que este comportamiento se lleva a cabo cuando la densidad óptica del medio es baja ($\tau \leq 1$).

A partir de los resultados obtenidos anteriormente se realizaron simulaciones con valores de (β) entre 0.10 y 0.13 [1/cm]. En donde se observó la relación esperada entre (φ) y (ω). Los resultados de estas simulaciones pueden verse en (apéndice B).

Para obtener los valores de albedo espectral, se emplearon las consideraciones generales descritas para el cálculo de albedo promedio. Sin embargo, los valores de (φ) y de (β) utilizados en las simulaciones del método de MCRT fueron valores espectrales en un intervalo de 400-700 [nm], y con valores de (g) de [-1 a 1]. Una vez obtenidos los resultados de estas simulaciones se realizó una interpolación lineal entre vectores (φ_λ) y (β_λ) para obtener el valor de (ω_λ) en un intervalo de 400-700 [nm]. Los resultados de estas simulaciones pueden verse en la sección (apéndice C).

4.4.6. Función fase (Φ) de Henyey-Greenstein

Las propiedades radiativas de un medio pseudo-continuo son 3: β_λ , ω_λ y $\Phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s})$, e incluso más, dependiendo del número de parámetros de forma usados en la función de fase. La representación de la función de fase de dispersión usa una expansión en la serie de polinomios de Legendre.

En el caso que se considere un medio no isotrópico el análisis en el caso aumenta su complejidad, lo que significa que sus propiedades radiativas dependen de la dirección de radiación incidente sobre cada volumen elemental del medio. La función fase (Φ) depende de ambas direcciones ($\Omega' \rightarrow \Omega$).

Cuando es posible asumir que el medio es isotrópico, la función de fase se expresa en términos del ángulo Θ entre las direcciones de la radiación incidente y dispersada en un posición dispersada. En aplicaciones de ingeniería, los medios a menudo se asumen como isotrópicos. Sin embargo, incluso con este supuesto, la función de fase varía con (Θ). En este caso la función se denomina anisotrópica.

Dado a que varios sistemas exhiben funciones de fase anisotrópica, lo que requiere de una expansión de alto orden y posteriormente, se necesita un número impresionante de coeficientes para definir la (Φ) a partir de una expansión de serie polinómica. Por lo tanto, generalmente se prefiere usar una función de fase basada en el menor número de parámetros de forma.

Entre los modelos útiles, la función de fase de Henyey-Greenstein Ec.(39), que solo involucra un parámetro de forma, denominado parámetro de asimetría (g_λ), es quizás la más popular [28].

$$P_{HG}(\Theta, g_\lambda) = \frac{1 - g_\lambda^2}{(1 + g_\lambda^2 - 2g_\lambda \cos \Theta)^{3/2}} \quad (39)$$

Donde (Θ) es el ángulo entre la dirección de radiación incidente y dispersada en un punto.

$$g_\lambda = \frac{1}{2} \int_0^\pi P_\lambda(\Theta) \cos(\Theta) \sin(\Theta) d\Theta \quad (40)$$

La función de fase de Henyey-Greenstein se usa a menudo como una función de fase aproximada por su simplicidad y su capacidad para capturar un amplio rango de un comportamiento de dispersión ya sea fuertemente hacia atrás o hacia adelante [3].

4.4.7. Determinación experimental del parámetro de asimetría (g) de la función de fase (Φ)

Debido a que las microalgas tienden a dispersar hacia enfrente parte de la radiación que índice sobre ellas, emplear la función de fase de Henyey-Greenstein resulta de gran utilidad debido a sus características explicadas en la sección anterior. Por lo tanto, al determinar el parámetro de asimetría (g_λ) es posible describir el comportamiento de la radiación que incide sobre un cultivo de microalgas.

El parámetro de asimetría (g_λ) de cultivo de microalgas *Chlorella vulgaris* UTEX 2714, se estimó en un intervalo de longitud de onda de 400-700 [nm]. Se trabajó a una concentración de 6.6 [g/m³] de biomasa, a temperatura ambiente de 25°C aproximadamente. El sistema experimental utilizando para estimar esta propiedad óptica fue el sistema de geometría esférica usado en la determinación del (ω_λ) (figura 14). En el cual la fuente de luz artificial emitida por un LED fue colimada a través del colimador (1) de 15 cm de longitud situado inmediatamente después del LED. El haz de luz emitido por la fuente de luz se propaga a través del colimador e incidió normal a la superficie del recipiente esférico de capacidad de 260 mL que contenía microalgas en suspensión las cuales se encontraban bien mezcladas.

Se realizaron 11 mediciones a diferentes ángulos sobre la superficie de la esfera, equidistantes una de la otra. Las mediciones se registraron con un sensor óptico con cable de fibra óptica de 2 m de longitud (marca: StellarNet Inc, modelo: F600-UVVIS-SR) conectado a un espectroradiómetro (marca: StellarNet Inc, modelo: Black-Comet C-50).

Para obtener una correcta medición de la intensidad de radiación dispersada por las microalgas fue necesario calibrar en cada punto angular medido. Las mediciones se hicieron desde un ángulo igual a 20° hasta un ángulo igual a 160° . Los resultados de las mediciones fueron normalizados respecto a la energía de radiación que sale del sistema por dispersión y no por transmisión. Dado que se busca observar la variabilidad angular de la energía dispersada por los microorganismos en suspensión.

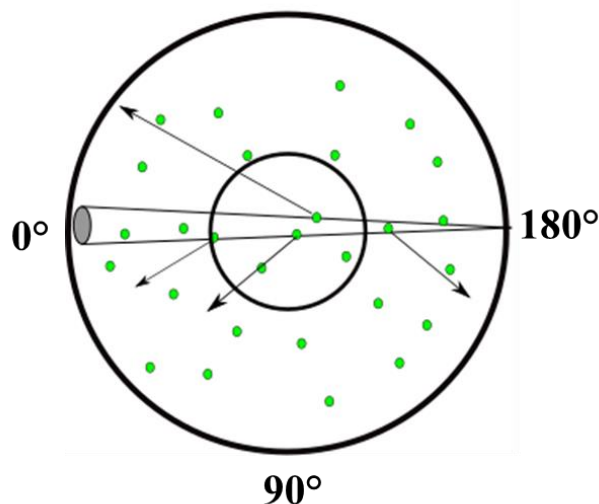


Fig. 16 Representación esquemática del fenómeno de dispersión lateral a diferentes ángulos provocado por la interacción de fotones con microalgas (vista superior del sistema esférico).

El esquema de la Figura 16 representa el fenómeno de dispersión provocado por el cultivo de microalgas contenido dentro del sistema esférico. El objetivo es observar la cantidad de energía dispersada por los microorganismos a diferentes posiciones angulares. El ángulo de 180° representa la posición por donde el haz de luz incide al sistema mientras que el ángulo de 0° representa la posición donde se proyecta el haz de luz después de propagarse a través de la esfera, de esa manera es fácil observar en qué posiciones angulares se obtiene un mayor valor de energía dispersada, con el fin de observar si la energía dispersada por las microalgas es hacia adelante o hacia atrás.

Por otra parte, se realizaron simulaciones computacionales utilizando el método de MCRT, para observar el efecto de la variación del parámetro de asimetría (g) en los perfiles de energía dispersada (φ) sobre el sistema esférico. En estas simulaciones es posible observar que los perfiles de energía dispersada son dependientes al cambio de (g_λ) pero independientes al valor del albedo (ω_λ). Este comportamiento se presenta la figura 17.

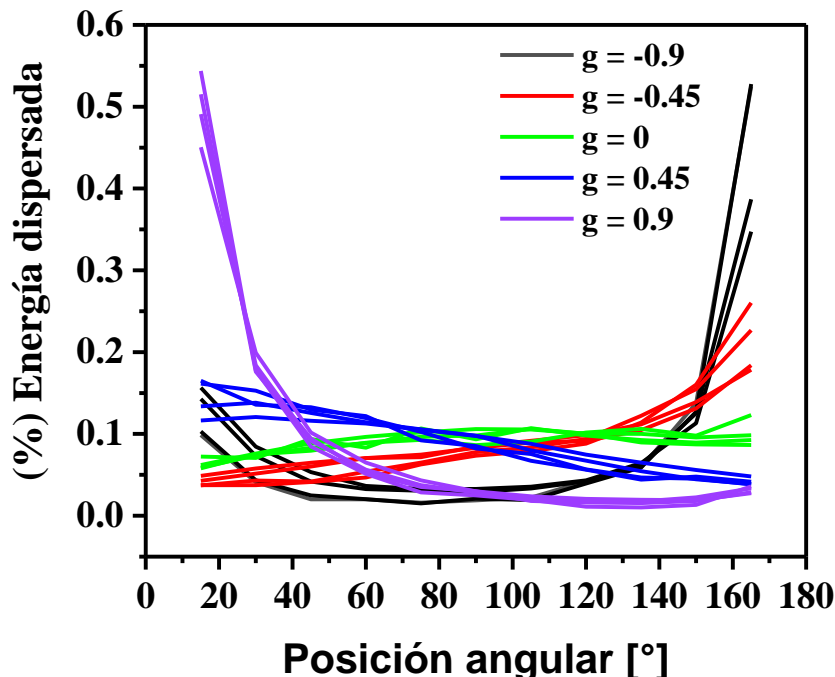


Fig. 17 Porcentaje de energía dispersada sobre la superficie del sistema esférico en función de la posición angular a diferentes valores de (g). Las diferentes series de datos de un mismo color representan la variación de la energía dispersada para albedos de 0.25, 0.5, 0.75 y 1.

La Figura 17 muestra el porcentaje de energía dispersada en función de la posición angular, a diferentes valores del parámetro de asimetría (g). El valor de la posición angular es de 0° a 180° , el ángulo cero representa la posición por donde el haz de luz sale del sistema y el ángulo igual a 180° representa la posición en la cual el haz de luz incide sobre el sistema. Es posible observar que a valores negativos de g iguales a -0.9 y -0.45 (líneas negras y rojas respectivamente) se observa que el porcentaje de energía dispersada en el sistema incrementa conforme la posición angular se aproxima a 180° lo que indica que predomina la dispersión de energía hacia atrás. Por otra parte, cuando " g " toma valores positivos (p.ej., de 0.45 y 0.9), el perfil de energía dispersada tiene un comportamiento opuesto al descrito anteriormente (la mayor cantidad de energía se dispersa hacia enfrente). En el caso cuando $g = 0$ se observa que la energía dispersada se mantiene prácticamente constante desde que entra al sistema (posición angular de 180°) hasta la mitad del sistema (90°) en donde comienza a decrecer aproximadamente a la mitad de su valor. Finalmente, se observa que los perfiles de energía dispersada se ven directamente afectados por la variación del parámetro de asimetría más que por el cambio del (ω_λ).

4.5. Simulación y desarrollo

Con el fin de cumplir con los objetivos planteados anteriormente, se requiere de la integración de los resultados experimentales y el enfoque numérico mediante el método de Monte Carlo Ray Trace (MCRT), para resolver la RTE dentro del sistema experimental y estimar las propiedades ópticas.

4.5.1. Método de Monte Carlo Ray Trace

El método de Monte Carlo Ray Trace consiste en el seguimiento de fotones individuales o haces de fotones desde su generación por una fuente de luz hasta que son absorbidos o dispersados por las partículas en suspensión dentro del sistema [27].

Para resolver la RTE en el sistema experimental de determinación de propiedades ópticas (geometría esférica Fig. 14) se requiere:

- (1) Parámetros ópticos del microorganismo de estudio, en este caso en particular de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 tales como: Coeficiente de extinción y albedo. Dichos parámetros están en función de la longitud de onda y fueron determinados previamente mediante la metodología experimental planteada en este proyecto.
- (2) Las condiciones de frontera del FBR deben seleccionarse cuidadosamente. La radiación emitida por la fuente debe definirse con precisión y las propiedades ópticas de las paredes del sistema también deben identificarse adecuadamente [27].
- (3) Establecer una función de fase. Dicha función calcula el ángulo en el cual los fotones son dispersados de una dirección a otra. Como resultado, seleccionar una función de fase permite calcular los eventos múltiples de dispersión. Es importante mencionar que, en las simulaciones del método de MCRT, el paso computacional más intensivo es frecuentemente establecer la nueva dirección del fotón dispersado[27].

En este método la RTE se resuelve promediando la trayectoria de distintos fotones (un número estadísticamente significativo de ellos). Se sigue la trayectoria de cada fotón “emitido” y la ubicación final del fotón absorbido se almacenan en una matriz. La trayectoria de cada fotón es definida en función de un proceso estocástico, en el que los eventos, resultados y probabilidades para cada fotón posible se eligen de manera que representen los fenómenos naturales que ocurren, en este caso en particular, dentro del sistema de determinación de propiedades ópticas.

Desde forma general, la simulación del MCRT comienza con las condiciones dadas para las reflectores y paredes del reactor. Estas condiciones estarán en función de los materiales utilizados y la geometría del sistema. La entrada total de energía y el espectro de radiación dependerán la fuente de luz empleada. Sin embargo, cuando los fotones están dentro del medio heterogéneo, la probabilidad de ser absorbido o dispersado será determinada por el propio medio de reacción [27].

Específicamente, se rastrean los fotones para cada longitud de onda. Se generan números aleatorios para establecer la ubicación en la fuente de luz, desde la cual se emitirá el fotón. Una vez que se establece la posición, la dirección de emisión también se identifica mediante ángulos aleatorios cenital y azimutal. La trayectoria del fotón se traza hasta que penetra en el medio de interés. Además, la probabilidad de que un fotón sea absorbido por unas de las paredes del reactor se basa en la transmitancia del material.

Dentro del medio, el fotón puede ser absorbido o dispersado debido a la interacción con una partícula en suspensión (microalga). Si el fotón está disperso, el ángulo de dispersión se deberá redefinir. El resultado se elegirá de acuerdo con la función de fase y su relación con otro número generado aleatoriamente. La trayectoria del fotón se modificará y el proceso se repetirá. Estos eventos se llevarán a cabo hasta que el fotón se absorba por una partícula o llegue a la pared del reactor, donde puede salir del sistema o ser absorbido por la pared del reactor.

La probabilidad de cada evento y cada posible resultado depende de las propiedades físicas del medio heterogéneo (microalgas en suspensión). Una vez que el fotón es absorbido por el medio de reacción, su ubicación se almacena en una matriz. Esta acción permite calcular el LVREA al sumar todos los fotones que fueron absorbidos en cada ubicación.

Las simulaciones del método de MCRT son sencillas de utilizar, siempre y cuando sea posible capturar los fenómenos físicos involucrados, como una unión de funciones de densidad de probabilidad. A pesar de todas sus ventajas, el principal problema del método de MCRT es la gran cantidad de eventos (transmisión, absorción o dispersión) que deben tenerse en cuenta en la simulación. Por lo tanto, se necesita de una gran potencia de computadora para la simulación del método de MCRT [27].

4.5.2. Fundamento teórico del método de Monte Carlo Ray Trace.

Para aproximar la función de Green de la ecuación de transferencia radiativa (RTE) es necesario emplear una formulación repetitiva. Esta formulación está basada en una expansión de perturbación respecto al albedo (ω) de las partículas, donde se obtiene una extensión de forma cerrada a la ley de Beer-Lambert calculando los primeros dos términos en la expansión y se explora su rango de aplicabilidad en un sistema finito comparándola con diferentes tipos de simulaciones de Monte Carlo Ray Trace.

Para un medio de absorción y dispersión a bajas temperaturas (menores a 200 °C), dentro de un marco no relativista, la RTE es una ecuación parcial lineal e íntegro diferencial definida como:

$$\frac{dI(\vec{x}, \hat{s})}{ds} = -\beta I(\vec{x}, \hat{s}) + \frac{1}{4\pi} \sigma \int_0^{4\pi} I(\vec{x}, \hat{s}') \Phi(\hat{s}, \hat{s}') d\Omega' \quad (41)$$

Donde (\vec{x}, \hat{s}) y $d\Omega$ representan la posición, dirección y el cono de ángulo sólido de la intensidad radiativa $I(\vec{x}, \hat{s})$; $\Phi(\hat{s}, \hat{s}')$ es la función fase y (β) y (σ) son los coeficientes de extinción y dispersión respectivamente. La RTE puede ser definida como una función de variables adimensionales, e integrada formalmente a lo largo de la trayectoria del rayo, que se expresa como:

$$I_\lambda(\vec{x}, \hat{s}) = I_0(\vec{x}_0, \hat{s}) e^{-\tau} + \int_0^\tau e^{-(\tau-\tau')} S(\vec{x}', s) d\tau' \quad (42)$$

Donde (ω) es el albedo de la partícula y (τ) es una distancia paramétrica adimensional, el espesor óptico a lo largo de la trayectoria del rayo. Sin embargo, $S(\vec{x}, \hat{s})$, referido como la función fuente, es una función de $I(\vec{x}, \hat{s})$. Libre de emisiones (para bajas temperaturas) se define como:

$$S(\vec{x}', \hat{s}) = \frac{\omega}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{x}', \hat{s}') \Phi(\hat{s}, \hat{s}') d\Omega' \quad (43)$$

Debe notarse que evaluar $I(\vec{x}, \hat{s})$ implica de antemano conocer $S(\vec{x}, \hat{s})$, sin embargo, lo opuesto implica lo mismo.

4.5.3. Expansión de perturbación de la RTE en (ω)

Dada la recursividad entre la Ec. (42) y (423), se presenta una aproximación, basada en la teoría de perturbación; una expansión asintótica con respecto al parámetro adimensional relevante para la dispersión: el albedo (ω). Físicamente, la interpretación es que el campo de intensidad radiativa se ensambla a partir de las contribuciones de fotones que experimentan un número diferente de eventos de dispersión ($I_n(\vec{x}, \hat{s})$), como:

$$I(\vec{x}, \hat{s}) = \sum_{n=0}^{\infty} I_n(\vec{x}, \hat{s}) \quad (44)$$

Donde n representa el número de eventos de dispersión experimentados. Al sustituir la Ec. (43) en la Ec. (42) y asumiendo que la función fuente no es conocida esta se puede ser corregida de forma iterativa, se puede obtener una formula recursiva para determinar cada momento ($I_{n+1}(\vec{x}, \hat{s})$) en la expansión de perturbación, a partir de su momento de orden inferior ($I_n(\vec{x}, \hat{s})$) por:

$$I_{n+1}(\vec{x}, \hat{s}) = \omega \int_0^{\tau_f} e^{-\tau'} \int_0^{4\pi} I_n(\vec{x}', \hat{s}') p(\hat{s} \cdot \hat{s}') d\Omega' d\tau' \quad (45)$$

Donde $p(\hat{s} \cdot \hat{s}')$ es función fase normalizada, es decir, $\left(\frac{\Phi(\hat{s} \cdot \hat{s}')}{4\pi}\right)$ y \vec{x}' es la posición del rayo incidente, definida como $\vec{x}' = \vec{x} - \tau' \hat{s}$, y τ' es la longitud adimensional de la trayectoria del fotón después de un n ésimo evento de dispersión, que abarca desde 0 hasta la distancia adimensional τ_f . En este sentido, τ_f es la distancia paramétrica (a lo largo de la dirección de propagación \hat{s}) al límite del dominio. Estrictamente $\tau_f = \infty$ para un dominio infinito.

Notar que si en la Ec. (45) ω sale de la integral, esta ecuación puede ser escrita como $I_{n+1}(\vec{x}, \hat{s}) = \omega L\{I_n(\vec{x}, \hat{s})\}$; donde L es un operador lineal, representando las integraciones en τ' y \hat{s} . Dado que el primer término de la serie implica resolver la RTE sin perturbación (es decir, $\omega = 0$), $I_0(\vec{x}, \hat{s})$ es una versión tridimensional de la ley de Beer (El campo de intensidad obtenido después de la atenuación de las fuentes de radiación), dejando la Ec. (44) como:

$$I(\vec{x}, \hat{s}) = \sum_{i=0}^{\infty} \omega^i L^i \{I_0(\vec{x}, \hat{s})\} \quad (46)$$

Donde en L^n , n representa el número de aplicaciones posteriores del operador lineal integral L .

Aunque, la intensidad de radiación es un campo de 5 dimensiones, áreas de investigación como la ingeniería de térmica y reacción, el interés reside en una variable de menor dimensión, el campo de absorción de radiación ($A(\vec{x})$). De acuerdo a la Ec. (46), el campo de absorción de radiación puede ser expresado como:

$$A(\vec{x}) = \beta \sum_{n=0}^{\infty} (1 - \omega) \omega^n \int_0^{4\pi} L^n \{I_0(\vec{x}, \hat{s})\} d\Omega \quad (47)$$

Donde $\beta(1 - \omega)$ es el coeficiente de absorción.

En una simulación típica de Monte Carlo Ray Trace, el campo de absorción $A(\vec{x})$, se forma a partir de la absorción de fotones que experimentan un número diferente de eventos de dispersión (n). Al ver la trayectoria de cada fotón como una cadena de Markov en un medio infinito, el peso asignado a cada término de la expansión asintótica en la Ec. (47) puede recibir una interpretación física.

En un dominio infinito, el albedo de una partícula (ω) es equivalente a la reflectancia de la partícula, es decir, la probabilidad de un evento de dispersión de fotones, después de interactuar una vez con una partícula; por el contrario, $(1 - \omega)$ representa la fracción de energía radiativa absorbida sin experimentar ningún evento de dispersión (justo después de la emisión). Por lo tanto, $(1 - \omega) \omega$ es la fracción de energía radiativa absorbida después de un solo evento de dispersión. Por ejemplo, la probabilidad de una dispersión de fotones una vez tras la interacción de partículas, multiplicada por la probabilidad de absorción después de una segunda interacción.

El coeficiente (peso relativo) asignado a cada término en la expansión de perturbación Ec. (46), ω^n , es proporcional a la fracción de energía radiativa, que se transmite a través de un dominio infinito, que experimenta n eventos de dispersión antes de la absorción (la función de distribución acumulativa discreta de pesos) es entonces:

$$P_n = \sum_{n=0}^{\infty} (1 - \omega) \omega^n = 1 - \omega^{n+1} \quad (48)$$

Como se espera, P_n tiende a 1 como n tiene a ser infinito. Sin embargo, la Ec. (48) señala un hecho interesante: la serie infinita propuesta en Ec. (46) converge bastante rápido para valores bajos-medios de albedo. Considerando a P_n como una función continua de ω y una función discreta de n ; por ejemplo, cuando se considera un albedo de 0.3 en un dominio infinito, el 97.3 % de la energía radiativa se dispersa dos veces o menos, antes de la absorción; el 91% se dispersa una vez o ninguna.

De esta manera, la intensidad radiativa, $I(\vec{x}, \hat{s})$, y el campo de absorción, $A(\vec{x})$, puede ser aproximado como la contribución ponderada de los procesos estocásticos que involucran un número reducido de eventos de dispersión.

4.5.4. Función de Green de la RTE

Si se considera una fuente puntal monodireccional (I_s) para la RTE ($I_s = I_b \delta(\hat{s} - \hat{s}_s) \delta(\vec{x} - \vec{x}_s)$), después de establecer un sistema de coordenadas cilíndricas ((\vec{r}, z) centradas en \vec{x}_s y orientadas en el eje positivo, z , a lo largo de \hat{s}_s , el momento cero de la Ec.(44), puede ser obtenido a través de diferentes caminos (aún equivalentes): 1) resolviendo RTE sin perturbación, (es decir $\omega = 0$) o 2) aplicando el operador lineal L en la fuente puntal unidireccional (como una fuente para I_0 , es decir, $I_0(\vec{x}, \hat{s}) = L\{I_s(\vec{x}, \hat{s})\}$). En cualquier caso, el termino de orden cero en la expansión asintótica $I_0(\vec{x}, \hat{s})$ se convierte en la ley de Beer-Lambert [34].

$$I_0(r, z, \phi_p, \hat{s}) = I_b e^{-z} \delta_s(\hat{s} - \hat{k}) \delta_c(\vec{r}) U(z) \quad (49)$$

Donde \hat{k} es el vector unitario a lo largo del eje positivo z . Debe notarse que $\delta_c(\vec{r})$ en la Ec. (49), es una delta función de r en coordenadas cilíndricas (en el plano x, y), es decir, $\frac{1}{r} \delta(r - r_0) \delta(\phi - \phi_0)$; por otro lado, $\delta(\hat{s} - \hat{k})$ es una dirección delta (en una esfera unitaria), que cuando se expresa en función de μ (el coseno del ángulo polar) y ϕ es entonces $\delta(\mu - \mu_0) \delta(\phi - \phi_0)$. Cuando \vec{x}_s se encuentra en un límite, el significado de la Ec.(49) sería el mismo que el de la función de Green de segundo orden, es decir, una solución to la RTE cuando no hay eventos de dispersión (o emisión). Por lo tanto, sustituyendo la Ec. (49) en la Ec. (45) debería producir una corrección a la función de Green $I_1(\vec{x}, \hat{s})$, que representa las contribuciones a $I(\vec{x}, \hat{s})$ de los fotones que representan un solo evento de dispersión [34].

Por lo tanto, si se requiere calcular la energía radiativa que se propaga en un punto y una dirección específica en el espacio $I(\vec{x}, \hat{s})$, después de $(n + 1)$ eventos de dispersión, se emplea la siguiente expresión :

$$I_{n+1}(\vec{x}, \hat{s}) = \omega \int_0^{\tau_f} e^{-\tau'} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I_n(\vec{x}', \hat{s}') \frac{\Phi_\lambda(\hat{s}, \hat{s}')}{4\pi} \underbrace{\text{sen}\theta d\theta d\phi}_{d\Omega'} d\tau' \quad (50)$$

La Ec. (50) representa la integración de todas la contribuciones de los fotones que pasan por (\vec{x}, \hat{s}) para el cálculo de la Intensidad de radiación en un punto y dirección específica, es decir, la primer integral de esta ecuación, representa la energía total que se propaga en la dirección de interés que es formada por el efecto de fotones provenientes de una dirección (\vec{x}', \hat{s}') , no obstante, estos fotones pueden sufrir un efecto de atenuación que es representado por el termino $(e^{-\tau'})$. Además, es necesario integrar la contribución de la energía radiativa que llega de otras direcciones tras sufrir eventos de dispersión, representado por $I(\vec{x}', \hat{s}')$ y que está compuesta por funciones delta $I_0(r, z, \phi_p, \hat{s})$ [34].

Por otra parte, una vez que los fotones avanzan una determinada distancia y sufren un evento de dispersión, se produce un cambio de dirección y por lo tanto el siguiente punto a evaluar en esta nueva dirección se define como $I_1(r, z, \phi_p, \mu, \phi)$, i.e., la intensidad de radiación en el punto (r, z, ϕ_p) y la dirección (μ, ϕ) debido a fotones que experimentaron un solo evento de dispersión. Por otra parte, la distancia recorrida de (I_0) a (I_1) se define como (τ') . La siguiente figura representa los fenómenos descritos.

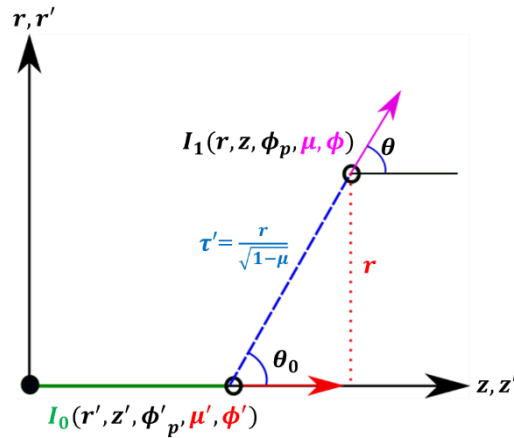


Fig. 18 Sistema de coordenadas, para mapear el procedimiento de la Ec. (48) para obtener $I_1(\vec{x}, \vec{\Omega})$ [34].

A lo largo de la posición \vec{x}' (referida en la Ec. 50) se representa como un vector cartesiano utilizando variables cilíndricas (z, r, ϕ_p) para la posición y en variables esféricas (ϕ, μ) para la dirección, como en la Figura 18. Como resultado $(I\vec{x}', \hat{s})$ en la Ec. (50) deber ser evaluada a lo largo de la trayectoria:

$$\vec{x}' = \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \cos \phi_p \\ r \sin \phi_p \\ z \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi \\ \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi \\ \mu \end{bmatrix} \tau' \quad (51)$$

Las variables con apostrofe (Figura 18 y Ec.51), desde el punto de vista físico, se refieren a la posición donde se experimentó el primer evento de dispersión; matemáticamente, son variables auxiliares (desaparecen después de la evaluación de la integral). Por otro lado, las funciones delta en la Ec. (49) implican que al estimar $I_1(\vec{x}, \vec{s})$, se esperan valores distintos de cero solo cuando ambas integraciones, externa e interna, en la Ec. (50) consideran; i) \hat{s}' está orientado en paralelo a lo largo de la dirección de la dirección positiva del eje z , es decir,

($\hat{s}' = \hat{k}$), ii) la combinación de \hat{s} y τ' produce $r' = 0$ (donde $r' = \sqrt{x'^2 + y'^2}$) o se define como una función de las variables presentes en la Ec. (51), entonces se expresaría como:

$$r' = \sqrt{(r \cos \phi_p - \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi \tau')^2 + (r \sin \phi_p - \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi \tau')^2} \quad (52)$$

Esta segunda condición implica, primero, que si a lo largo de la trayectoria \vec{x}' esta produce un valor diferente de cero para I_1 , esto es en $r' = 0$. Además, para que la solución de la Ec. (52) produzca un valor real distinto de cero, entonces ϕ a τ' debe establecerse en valores específicos, como se puede ver en las raíces obtenidas en la Ec. (52):

$$\tau' = \frac{r}{\sqrt{1 - \mu^2}} \left(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 1} \right) \quad (53)$$

Donde $\alpha = \cos \phi_p \cos \phi + \sin \phi_p \sin \phi$, es decir, estableciendo que $\phi = \phi_p$ ($\alpha = 1$) para que la solución sea real; entonces, $\tau' = \frac{r'}{\sqrt{1 - \mu^2}}$. Con esta base, $\delta_c(\vec{r}')$ (mapeado en coordenadas cilíndricas) se expresa como: $\frac{1}{r} \delta(r - \tau' \sqrt{1 - \mu^2}) \delta(\phi - \phi_p)$. Finalmente, se debe ser cuidadosa para considerar que $\delta(\hat{s} - \hat{k})$ está en coordenadas esféricas, implicando $\delta(\phi - \phi') \delta(\mu - 1)$. Por lo tanto, $I_0(\vec{x}', \hat{s}')$ de la Ec. (50) tendrá la siguiente forma:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi I_b e^{-z'} \delta(\mu' - 1) \delta(\phi - \phi') \delta(\phi - \phi_p) \frac{\delta(r')}{r'} \Phi(\mu) U(z') d\phi' d\mu' \quad (54)$$

Integrando la Ec. (54) respecto a ϕ' y μ' se obtiene lo siguiente:

$$I_1(\vec{x}, \hat{s}) = \omega \frac{I_b}{r} e^{-z'} \cdot e^{-\frac{(1-\mu)r}{\sqrt{1-\mu^2}}} \Phi(\mu) \delta(\phi - \phi_p) U(z \sqrt{1 - \mu^2} - \mu r) \quad (55)$$

Para poder muestrear la Ec. (55) como una función de distribución y probabilidad, es necesario emplear el método de Monte Carlo, que implica integrar e invertir la función respecto a $(r dr d\mu)$. Donde $d\mu = \sqrt{1 - \mu^2} d\theta$. Por lo tanto, el resultado de integrar la Ec. (55) es el siguiente [34].

$$\frac{I_1}{I_b} = \omega e^{-z'} \cdot e^{-\frac{(1-\mu)r}{\sqrt{1-\mu^2}}} \Phi(\mu) \quad (56)$$

La Ec. (56) puedes reescribirse de la siguiente manera:

$$\frac{dE}{E_0} = \omega e^{-l_1} \cdot e^{-l_2} p(\mu) \quad (57)$$

La Ec. (57) representa la relación entre un diferencial de energía y la energía que entra por la frontera del sistema (E_0). Donde el termino (l_1) representa la distancia de propagación del fotón una vez emitido, (l_2) representa la distancia recorrida una vez que sufre un evento de dispersión y (μ_s) representa el ángulo de dispersión formado por el cambio de dirección de (l_1). Estos eventos corresponden al operador lineal (L^n) descrito en la Ec. (46). Los fenómenos presentes en esta expresión matemática son representados esquemáticamente por la Figura 19.

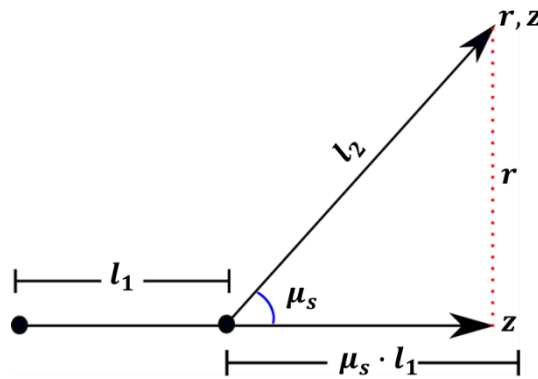


Fig. 19 Representación esquemática de la propagación y cambio de trayectoria de un fotón debido a un evento de dispersión.

El cálculo de (z) y (r) pueden ser calculados con las expresiones (58) y (59):

$$l_1 + \mu_s l_2 = z \quad (58)$$

$$\sqrt{1 - \mu_s^2} \cdot l_2 = r \quad (59)$$

De esta manera es posible representar la trayectoria de los fotones dentro del sistema y los fenómenos de transporte radiativos que pueden llegar a sufrir durante su propagación, utilizando este proceso iterativo que está basado en la función de Green que es una serie infinita. Todo el desarrollo de la metodología presentada en esta sección está basado en el trabajo de M. A. Ramirez Cabrera et al. [34].

4.5.5. Simulación de la RTE por el método de Monte Carlo Ray Trace aplicado al sistema experimental de propiedades ópticas

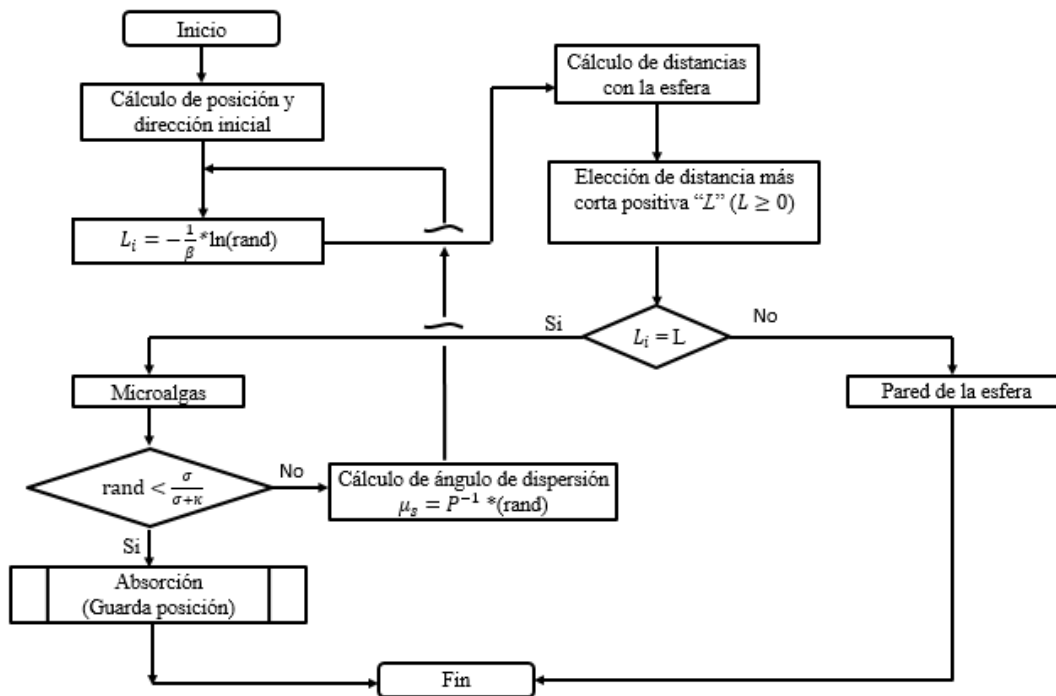


Fig. 20 Algoritmo de programación del método de Monte Carlo para la solución de la RTE.

El algoritmo inicia con la emisión de un fotón. Por lo tanto, se calcula posición y dirección inicial. Después se calcula las posibles distancias que el fotón puede recorrer dentro del sistema, esta distancia es calculada en función de un número aleatorio normalmente distribuido y del valor del coeficiente de extinción, posteriormente se lleva a cabo la elección de la distancia más corta positiva, ya sea que el fotón haya interactuado con las microalgas en suspensión o con la pared del reactor. Es importante mencionar que la derivación matemática descrita en la sección anterior es para un medio infinito, por lo que el propagador no contempla la elección de distintas distancias como en el caso de un medio finito (sistema experimental representado en la Figura 14). En el caso de que exista una interacción con una microalga, se compara el valor de un número aleatorio en el intervalo de 0-1 con el valor del (ω) , si el valor del número aleatorio es menor que el del (ω) , se considera que el fotón ha sido absorbido y se guarda dicha posición. Por el contrario, si el valor del número aleatorio es mayor al valor del (ω) se considera que el fotón ha sido dispersado y se procede al cálculo del ángulo de dispersión (μ_s) y la nueva dirección de dicho fotón y de esa manera calcular una nueva posición y dirección inicial del fotón. En el caso del que el fotón interactúe con la pared del reactor su recorrido en el sistema se da por terminado ya que se asume que dicho fotón sale del sistema. Para mayor información acerca de los métodos de Monte Carlo consultar la referencia [35].

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

EL propósito principal de esta sección es presentar el comportamiento de los principales fenómenos radiativos presentes en los sistemas experimentales empleados para la estimación de las propiedades ópticas y con ello evaluar la contribución de cada fenómeno radiativo en el cultivo de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714.

5.1. Efecto de la concentración de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 en la cantidad de intensidad radiativa transmitida.

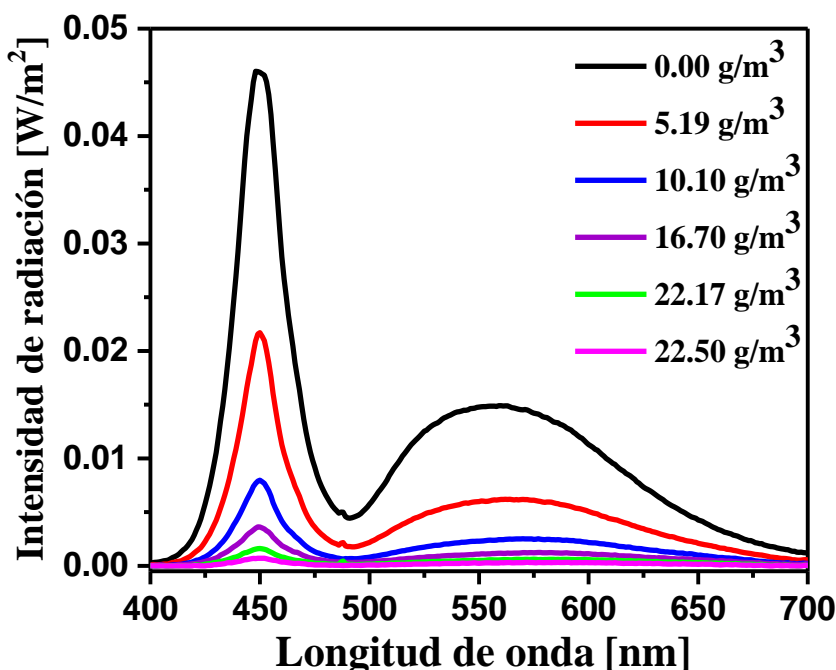


Fig. 21 Cambio de la intensidad de radiación transmitida [W/m^2] en función de la concentración de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 en suspensión.

La Figura 21 muestra el efecto de la concentración de biomasa en la cantidad de intensidad de radiación transmitida y dispersada hacia enfrente [W/m^2] a través del cultivo de microalgas, en el intervalo de 400-700 [nm]. Las concentraciones utilizadas fueron (5.19, 10.10, 16.70, 22.17 y 22.50 g/m^3). Se observa que la mayor cantidad de energía transmitida y dispersada hacia enfrente presenta valores máximos a los 450 [nm] y 550 [nm], 0.021 [W/m^2] para la mínima concentración de biomasa y 0.001 [W/m^2] para la máxima concentración de biomasa. Por otra parte, en los intervalos de 460 a 500 y 675 a 700 [nm] la cantidad de energía transmitida y dispersada hacia enfrente es mínima, debido a que la fuente de luz emite bajas cantidades de energía en esas zonas. Estos resultados fueron el punto de partida para establecer la concentración máxima de biomasa que permitió obtener lecturas precisas de intensidad de radiación para la estimación de las propiedades ópticas.

5.2. Coeficiente de extinción específico promedio del cultivo de microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714

En las siguientes sub secciones se presentan los resultados obtenidos del coeficiente de extinción específico promedio y espectral de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 y una comparación con resultados de la microalga *C. reinhardtii* obtenidos de la literatura.

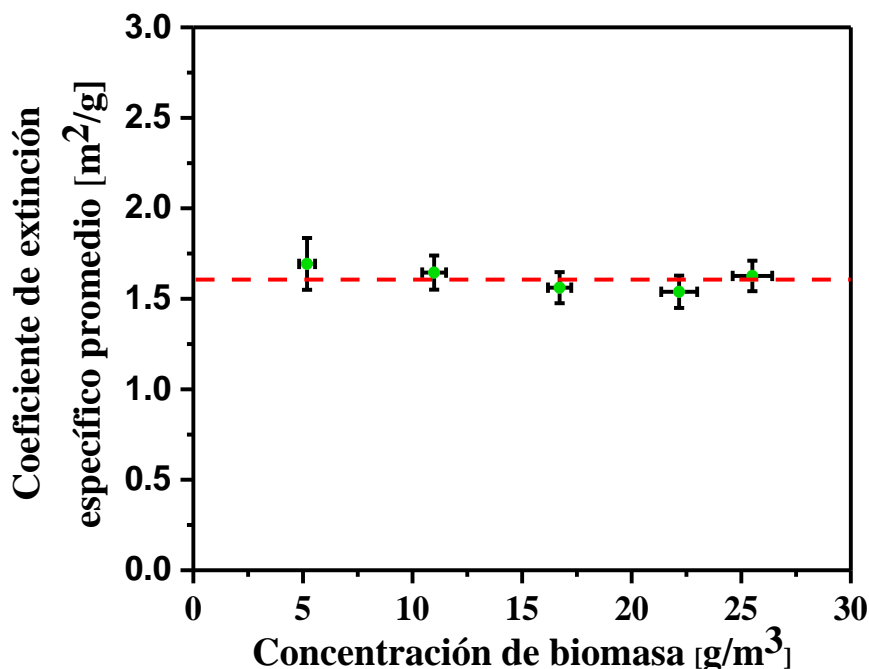


Fig. 22 Coeficiente de extinción específico promedio β^* de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 a diferentes concentraciones de biomasa.

La Figura 22 muestra el coeficiente de extinción específico (β^*) en función de la concentración de biomasa (5.2, 10.10, 16.70, 22.2 y 22.5 g/m³). En esta gráfica se observa que el coeficiente de extinción específico determinado experimentalmente es constante e independiente de la concentración de biomasa, tomando valores de (1.68, 1.64, 1.60, 1.54 y 1.62 m²/g). Esto sugiere que el tamaño del aglomerado (o lo que el transporte radiativo define como partícula) no cambia de tamaño. Es de esperarse que las otras propiedades radiativas, como el albedo y la función de fase, también sean independientes de la concentración de biomasa (dentro de ese mismo rango). Esto va acorde a reportes que afirman que las microalgas tienen mecanismos bien establecidos para controlar la aglomeración en el corto plazo; los tamaños de partícula se ven afectados esencialmente por condiciones específicas de cultivo. Cuando la microalga se adapta, la aglomeración surge solo como una estrategia para contrarrestar condiciones adversas para su crecimiento, como alta turbulencia, presencia de mucha (o muy poca) luz, o de algún otro nutriente.

5.3. Coeficiente de extinción específico espectral del cultivo de microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714

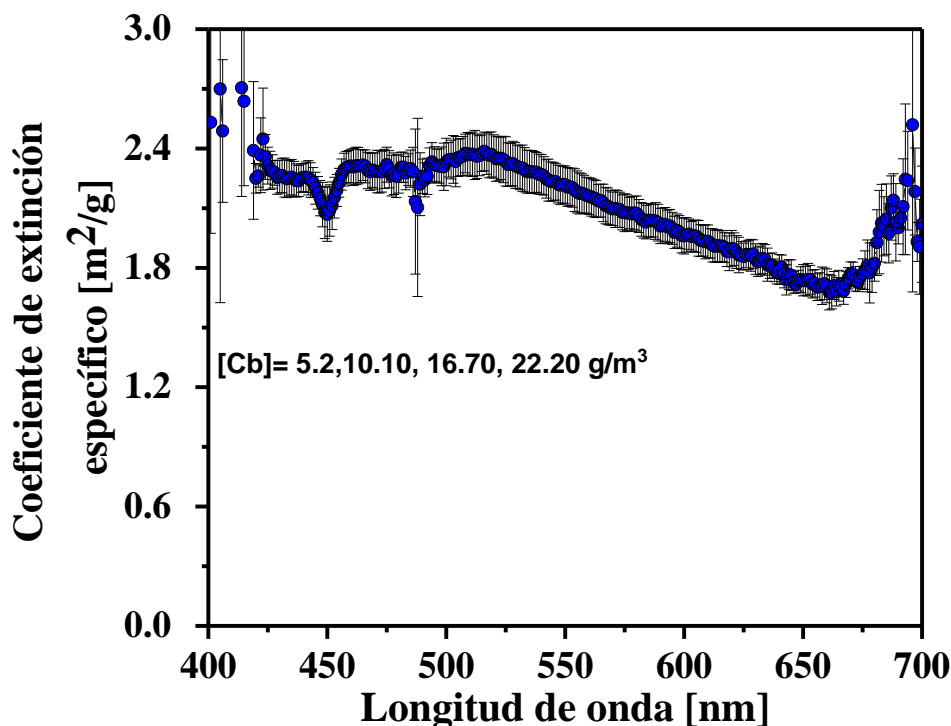


Fig. 23 Coeficiente de extinción específico (promedio de 4 concentraciones diferentes) (β_{λ}^*) de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714.

La Figura 23 muestra el comportamiento del promedio de los valores del coeficiente de extinción específico (β_{λ}^*) de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 a diferentes concentraciones de biomasa (5.2, 10.10, 16.70, 22.20 g/m^3) en función de la longitud de onda en el intervalo de 400 – 700 [nm]. El gráfico muestra que en la primera región ubicada entre los 400 y 420 [nm] el valor promedio del (β_{λ}^*) es variante, esto es debido a que la fuente de luz utilizada para determinar esta propiedad tiene una baja emisión en esta región y por lo tanto genera error al momento de calcular dicha propiedad. Por otra parte, en la zona de 450 [nm] existe un valle que nos indica que la interacción de los fotones con los microorganismos es baja, esto puede asociarse con el comportamiento del espectro de luz de la fuente (figura 21) en donde la mayor cantidad de energía transmitida se da justo a los 450 [nm]. En el intervalo de 460 a 510 [nm] el coeficiente de extinción espectral promedio es constante, indicando que es la zona de mayor probabilidad de interacción entre fotones y partículas (microalgas en suspensión). Finalmente, en un intervalo de 510 a 650 [nm] se observa un comportamiento monótono decreciente tomando un valor de mínimo aproximado de 1.6 [m^2/g], esto puede atribuirse a que en esta zona espectral los pigmentos contenidos en microalgas no presentan picos de absorción por lo que permiten el paso de los fotones.

Con el fin de contrastar los resultados obtenidos del (β_{λ}^*) de la microalga *C. vulgaris* UTEX 2714 se presenta el (β_{λ}^*) de la microalga *C. reinhardtii* CC125 en un intervalo de 400 a 700 [nm], a 3 diferentes concentraciones de biomasa (89.80, 138.60, 184 g/m^3). Resultados reportados por Berberoglu et al. [25]. La Figura 24 muestra que el (β_{λ}^*) de la microalga *C. reinhardtii* CC125 es independiente de la concentración y moderadamente dependiente de la longitud de onda, características similares a *C. vulgaris* UTEX 2714.

Por otra parte, al comparar los valores del coeficiente de extinción específico de estos dos tipos de microalgas, se observa que para *C. vulgaris* UTEX 1714 el valor del coeficiente de extinción específico es casi dos veces más grande que el reportado para *C. reinhardtii*, esto puede atribuirse a la diferencia de composición bioquímica y tamaño de estos microorganismos que son 1-6 μm y 10 μm , respectivamente. Este comportamiento concuerda con la teoría radiativa que señala que la naturaleza de interacción entre los fotones y partículas (microalgas en este caso) está determinada por el tamaño relativo de las partículas con respecto a la longitud de onda [24]. Además, la teoría radiativa señala que, al tratarse como partículas grandes con respecto a la longitud de onda, el valor del coeficiente de extinción específico no dependerá fuertemente de la longitud de onda y se será independiente de la concentración, siempre y cuando el tamaño de la partícula no cambie (no existan cambios significativos de aglomeración), tal como se observa en los resultados de la literatura y de este proyecto.

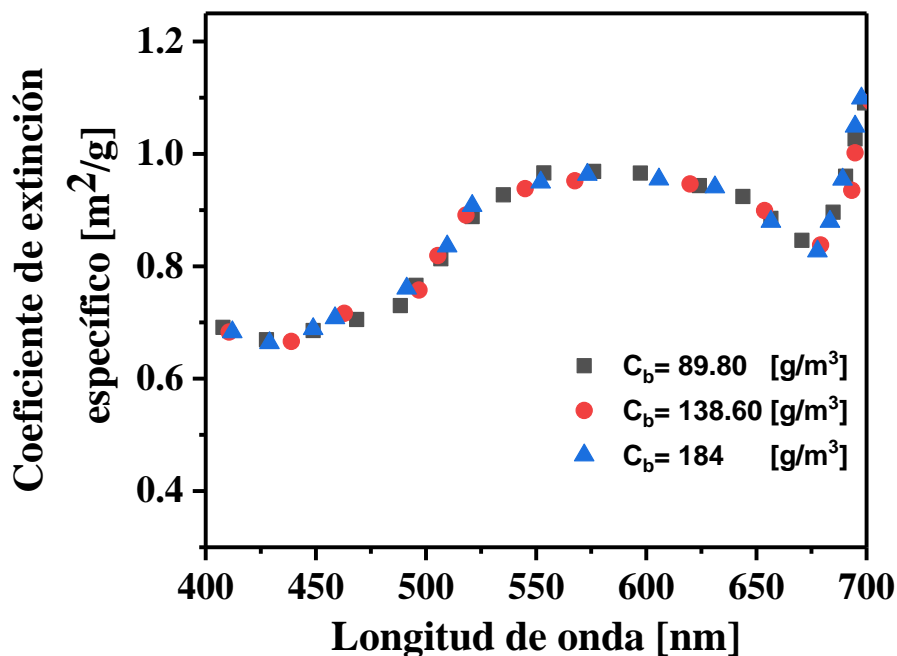


Fig. 24 Coeficiente de extinción específico (a 3 concentraciones diferentes) (β_{λ}^*) de la microalga *C. reinhardtii* CC125 [25].

5.4. Coeficiente de extinción específico promedio estimado en sistemas de diferentes geometrías (Cilíndrica y esférica)

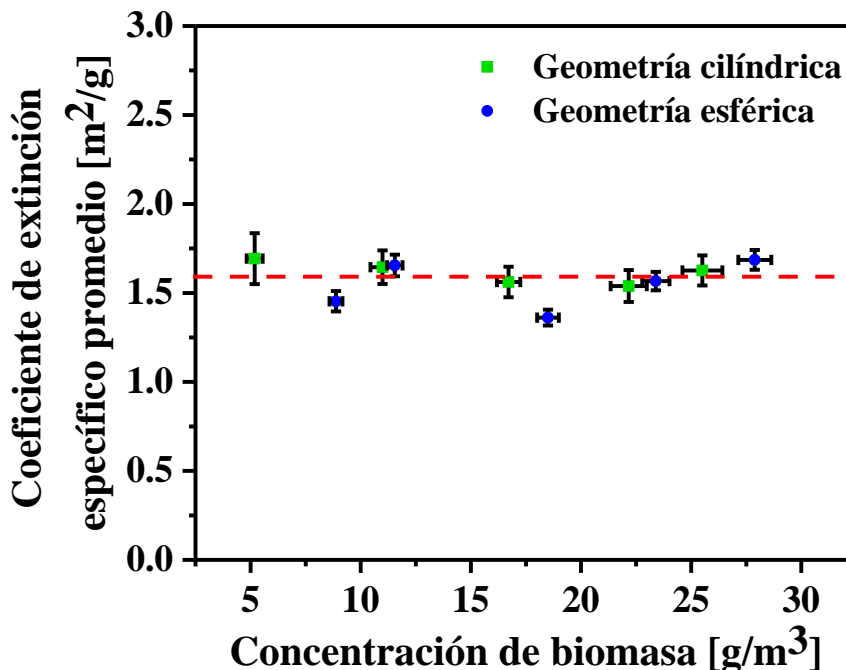


Fig. 25 Coeficiente de extinción espectral a diferentes concentración de biomasa, determinado en diferentes geometrías.

La Figura 25 muestra los resultados experimentales obtenidos del coeficiente de extinción específico (β^*) a diferentes concentraciones de biomasa determinados en dos diferentes geometrías (cilíndrica y esférica). Se observa que los valores obtenidos del (β^*) en el sistema esférico son constantes e independientes de la concentración de biomasa al igual que los resultados obtenidos en la geometría cilíndrica. Además, al hacer una comparación entre los valores obtenidos en las diferentes geometrías se observa que no hay diferencia significativa entre sus valores, por lo que se puede asumir que la interacción entre los fotones y el cultivo de microalgas es muy similar en ambos sistemas. Finalmente, estos resultados son indicación de que la metodología empleada para determinar esta propiedad óptica es funcional e insensible al cambio de geometría. Además, el uso de un sistema con geometría esférica permite que las mediciones de energía dispersada por el cultivo de microalgas sean más sencillas y rápidas de realizar, puntos importantes que se buscan para establecer una nueva metodología para la estimación de propiedades ópticas de microalgas. En las siguientes secciones se presentan y describen los resultados obtenidos de albedo y parámetro de asimetría de la microalga de estudio a partir de mediciones experimentales de energía dispersada por el cultivo de microalgas contenido en el sistema esférico.

5.5. Estimación del albedo promedio a partir de simulaciones computacionales por el método de MCRT

Los resultados de esta sección muestran la importancia de trabajar a valores de espesor óptico de ($\tau \leq 1$) dado que cuando el valor de (τ) sobre pasa esta restricción, la relación entre el porcentaje de energía dispersada (φ) y el albedo (ω) tienen un comportamiento no lineal por lo que estimar el valor de albedo se complica al presentar dependencia del parámetro de asimetría (g) factor principal de la función de fase de Henyey Greenstein. Por lo tanto, se realizaron simulaciones para observar el comportamiento de los perfiles de (φ) en función del (ω) en todo el rango de los valores de (g) de 0 a 1 para determinar que concentración de biomasa permite trabajar a valores de ($\tau \leq 1$) con lo que se obtendrá independencia de (g). Con el fin de contrastar este comportamiento se presentan los siguientes gráficos, a) Simulaciones del porcentaje de energía transmitida y dispersada a diferentes valores de (τ) estimados a partir de diferentes concentraciones de biomasa y b) simulaciones a valores máximos y mínimos del espesor óptico.

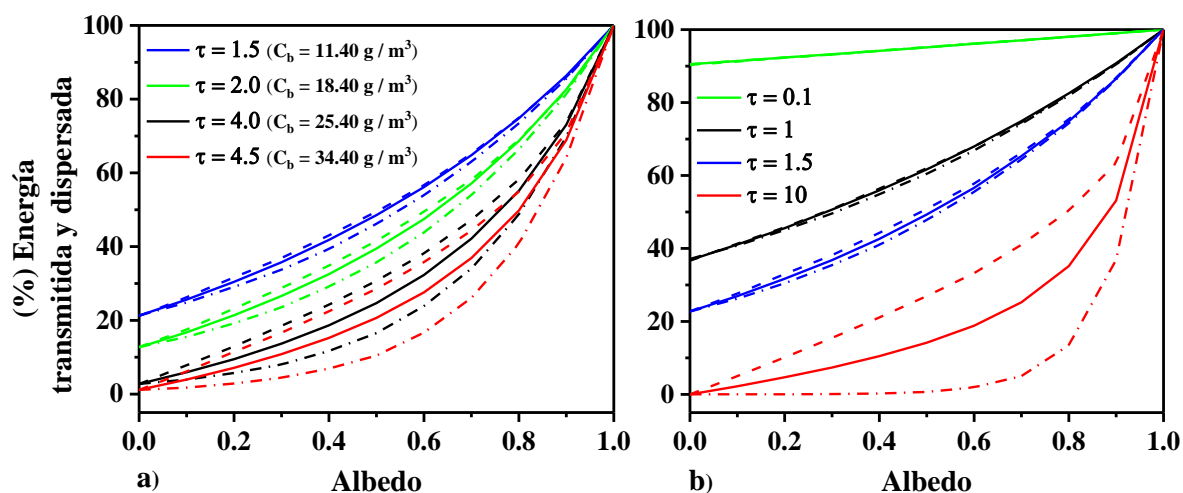


Fig. 26 Simulaciones de energía transmitida y dispersada vs albedo a diferentes valores de τ , a) valores de τ estimados a partir de diferentes concentraciones de biomasa, b) valores máximos y mínimos de τ . Las líneas punteadas son $g=-1$, intermitentes $g=1$ y líneas solidas son un promedio de todo el rango en g . La longitud del dominio es de 8.24 cm.

En la Figura 26-a se muestra el comportamiento de (φ) a través del sistema en función del albedo (ω) a diferentes valores del parámetro de asimetría (g) y de profundidad óptica (τ) del cultivo de microalgas. Para cada valor de (τ) se observan 3 líneas, la línea punteada representa el comportamiento de (φ) cuando ($g = -1$), intermitentes ($g=1$) y la línea solida representa el valor promedio de todo el rango de (g) para el valor especificado de (τ). Es posible observar que a medida que el valor de la profundidad óptica incrementa, el rango de (g) es cada vez más amplio, debido a que los valores extremos del parámetro de asimetría se alejan uno del otro. Por lo tanto, a valores de ($\tau = 1.5$ y 2) el comportamiento del porcentaje

de energía dispersada (φ) es casi independiente del valor de (g). En contraste, cuando la profundidad óptica del medio aumenta a valores de ($\tau = 4$ y 5) en donde los perfiles de (φ) son dependientes del parámetro de asimetría.

La Figura 26-b represente el comportamiento de los perfiles de (φ) a diferentes valores de la profundidad óptica del medio (valores máximos y mínimos), donde es posible observar que a valores de ($\tau \leq 1$) es posible considerar que hay una relación aproximadamente lineal entre (φ) y (ω) albedo. Por lo tanto, hay independencia de (g). Por otra parte, cuando la profundidad óptica del medio incrementa, la independencia del parámetro de asimetría desaparece, estos comportamientos se pueden observar a valores de ($\tau > 1$). Por ejemplo, cuando ($\tau = 1.5$ y 10) tal como se muestra en este gráfico. La finalidad de esta simulación es corroborar que a medida que el valor del espesor óptico es mayor a uno la relación línea entre (φ) y (ω) desaparece y por consecuencia el parámetro de asimetría juega un papel importante en contraste con valores espesor óptico menores o iguales a uno.

5.6. Albedo promedio del cultivo de microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714.

En las presentes sub secciones se muestran los resultados obtenidos de albedo promedio y espectral para la microalga *Chlorella vulgaris*. Además, de una comparación con resultados de la literatura. A partir de los resultados de albedo promedio se determinó la concentración de biomasa para la estimación del albedo espectral.

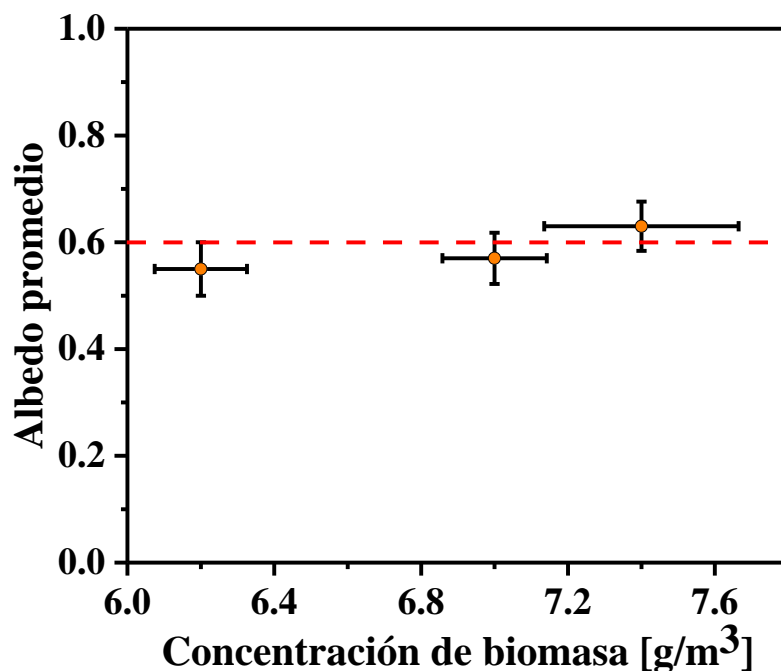


Fig. 27 Albedo promedio del cultivo de la microalga en suspensión *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 a 3 diferentes concentraciones de biomasa.

La Figura 27 muestra valores del albedo promedio de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714, en función de la concentración de biomasa en $[g/m^3]$ de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 (6.2, 7 y $7.4 g/m^3$). En este gráfico se observa que los valores de albedo promedio obtenidos experimentalmente son constantes e independientes de la concentración, lo que es señal de que la reflectancia de los microorganismos en suspensión es insensible al cambio de concentración caso similar al del coeficiente de extinción específico promedio, en el que la probabilidad de interacción no cambia debido a la concentración. Además, las concentraciones empleadas para determinar esta propiedad radiativa son considerablemente bajas por lo que el cultivo de estudio es considerablemente homogéneo y es posible asumir que la densidad óptica tiene un valor $\tau \leq 0.1$ en la cual la mayoría de la fotones se ven afectos por un solo evento de dispersión.

5.7. Albedo espectral del cultivo de microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714.

La Figura 28 muestra el comportamiento del albedo espectral (ω_λ) determinado experimentalmente a una sola concentración de biomasa ($6.6 g/m^3$) en función de la longitud de onda, en un intervalo de 415-685 [nm].

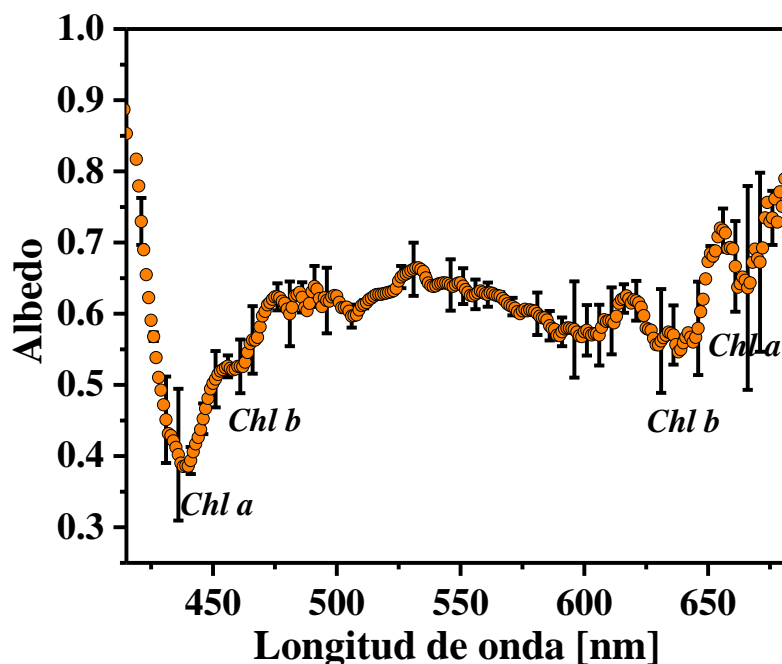


Fig. 28 Albedo espectral del cultivo de la microalga en suspensión *Chlorella vulgaris* UTEX 2714.

La Figura 28 muestra en la primera zona de 415 a 440 [nm] aproximadamente el valor espectral del albedo para la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714, tiene un comportamiento monótono decreciente de un valor de 0.9 a 0.4 aproximadamente indicando que el fenómeno de absorción denomina a valores bajos de longitud 415-425 [nm]. En el intervalo de 415 a 450 [nm] el valor de (ω_λ) tiene un incremento paulatino hasta alcanzar un valor de máximo de 0.65, con lo cual es posible asumir que el 65% de la energía que interactúa con el microorganismo es reflejada. Entre los 500 y 625 [nm] el valor del (ω_λ) se mantiene aproximadamente constante, eso puede atribuirse a que este tipo de microorganismos contienen pigmentos como la *clorofila a* y *b*, las cuales en el intervalo de longitud antes mencionado presentan valores absorción muy bajos, por lo que se puede asumir que el efecto de dispersión es dominante. Finalmente en la última zona 625-685 [nm] el comportamiento del (ω_λ) es variante, tomando un valor máximo de 0.7 y mínimo de 0.65, esto puede atribuirse que debido a que la *clorofila a* y *b* presentan picos de absorción en estos valores longitudes de onda por lo que cierta porcentaje de la energía es absorbido por las clorofilas presentes en la microalga. El espectro del coeficiente de absorción de los pigmentos primarios puede observarse en la Figura 2.

Para contrastar los resultados obtenidos del albedo espectral de la microalga *Chlorella vulgaris* se presenta el albedo espectral de la microalga *C. reinhardtii* calculado a partir de los valores del coeficiente de absorción (κ_λ) y dispersión (σ_λ) reportados por Berberoglu et al.[25], en un intervalo de 400 a 700 [nm], a 3 diferentes concentraciones de biomasa (89.80, 138.60, 184 g/m³). La Figura 29 muestra que la microalga *C. reinhardtii* presenta mayor absorción a los 435 y 675 [nm] correspondiente a la absorción de la *clorofila a* y a los 475 y 650 [nm] correspondiente a la absorción de la *clorofila b*. Además, presenta un intervalo de 550 a 650 [nm] en el cual el valor del albedo es aproximadamente constante igual a 0.9 lo que indica que el fenómeno de dispersión domina sobre la absorción.

En comparación con los resultados obtenidos de la microalga *Chlorella vulgaris* que presenta puntos de absorción en zonas similares a los resultados de la microalga *C. reinhardtii*. Sin embargo, debido a que son microalgas diferentes y el contenido de pigmentos absorbentes de luz como la *clorofila a* y *b* se presenta en diferentes cantidades en cada microalgas, la cantidad de absorción y dispersión de energía es diferente presentando diferentes valores de albedo a lo largo del PAR.

Finalmente, La cantidad de energía reflejada por estos dos tipos de microorganismos fotosintéticos son fuertemente dependientes de la longitud de onda lo que resulta la importancia de estimar las propiedades radiativas de manera espectral. Además, de mostrar que es importante realizar estudios de la función de fase debido a que los valores de albedo son mayores a 0.5.

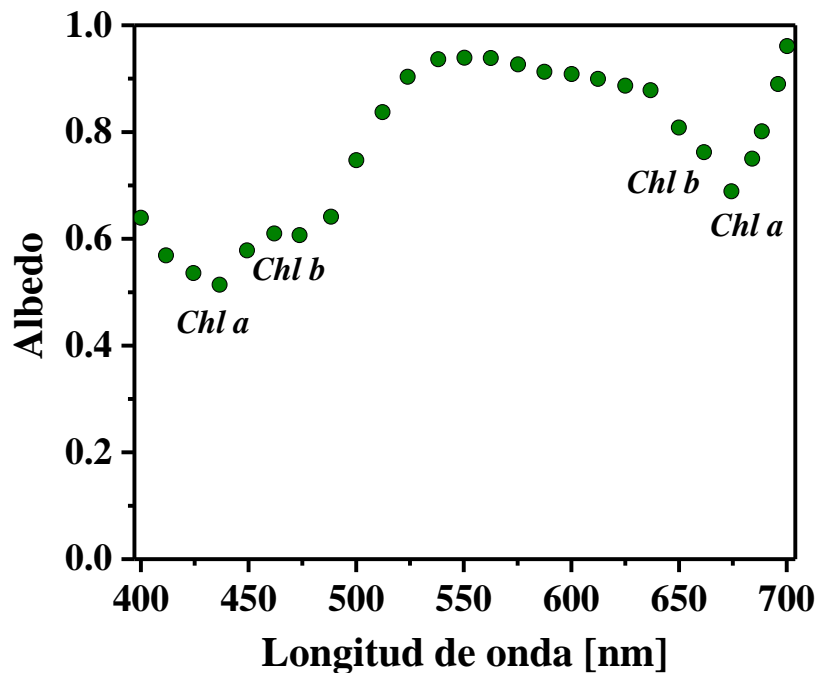


Fig. 29 Albedo (ω_λ) de la microalga *C. reinhardtii* CC125 estimado a partir de valores del coeficiente de absorción (κ_λ) y dispersión (σ_λ) [25].

5.8. Variabilidad angular del porcentaje de energía dispersada por el cultivo de microalgas *Chlorella vulgaris* en función del parámetro de asimetría $\langle g \rangle$

Los resultados de esta sub sección muestran la variabilidad angular del porcentaje de energía dispersada lateralmente sobre toda la superficie del sistema esférico. Sin embargo, a diferencia de los perfiles de energía presentados en las simulaciones de la Figura 17, estos nuevos perfiles son un promedio de cada uno de los resultados obtenidos en función de los diferentes valores del parámetro de asimetría y albedo, dado que el valor del albedo no muestra cambios significativos en los perfiles de energía dispersada es posible promediarlos. Por lo tanto, en la Figura 30 los perfiles de energía dispersada se presentan en función de un valor promedio del parámetro de asimetría definido como $\langle g \rangle$. Además, de presentar valores de energía dispersada medidos experimentalmente a diferentes posiciones angulares con lo que es posible determinar el valor aproximado de $\langle g \rangle$ y la forma en la cual se dispersa la energía ya sea hacia enfrente ($g = 0.45$ y 0.9) o hacia atrás ($g = -0.45$ y -0.9).

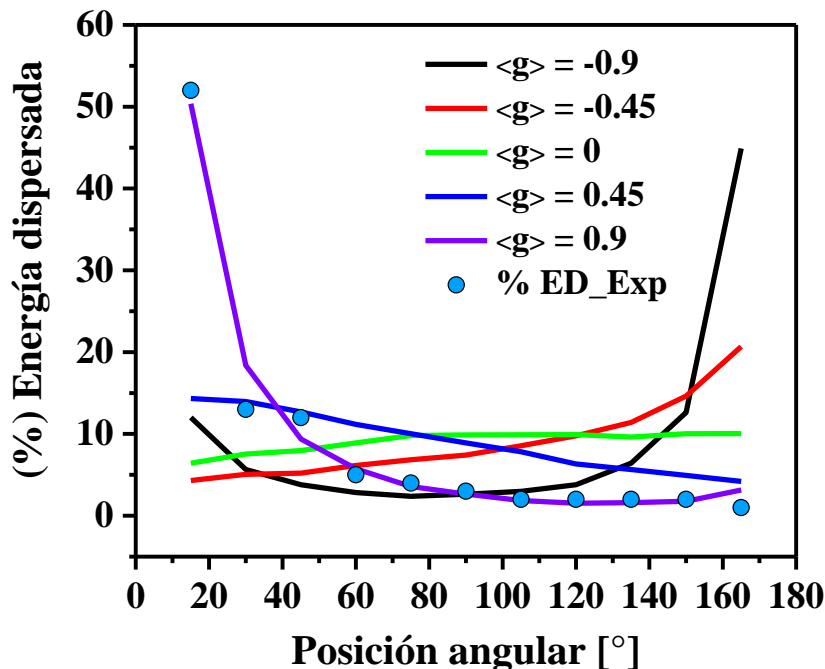


Fig. 30 Porcentaje de energía dispersada vs posición angular a diferentes valores de $\langle g \rangle$ promedio en el sistema para determinación de propiedades ópticas (geometría esférica).

La Figura 30 muestra el porcentaje de energía dispersada en función de la posición angular, a diferentes valores $\langle g \rangle$ (-0.9 a 0.9 en incrementos de 0.45). La posición angular es de 0° a 180° donde 180° representa la posición a la cual el haz de luz incide en el sistema y 0° representa la posición donde se proyecta el haz de luz (sale del sistema). Comenzando por el análisis del valor de $\langle g \rangle = -0.45$ y -0.9 (línea color roja y negra respectivamente) se observa que el porcentaje de energía dispersada en el sistema esférico incrementa conforme la posición angular se aproxima a los 180° por lo que se considera que la dispersión de energía es hacia atrás. Por otro parte, cuando $\langle g \rangle$ toma valores de 0.45 y 0.9 positivos, el porcentaje de energía dispersada tiene un comportamiento opuesto a lo descrito anteriormente, debido a que conforme la posición angular se aproxima a los 180° el valor del porcentaje de energía dispersada decrece, esto indica que la energía se está dispersando hacia adelante. En el caso cuando $\langle g \rangle = 0$ se observa que la energía dispersada se mantiene prácticamente constante desde que entra al sistema (posición angular de 180°) hasta la mitad del sistema (90°) en donde comienza a decrecer aproximadamente a la mitad de su valor. Finalmente, en esta figura se observa que los datos experimentales (círculos azules) se ajustan a un comportamiento donde predomina la dispersión de energía hacia adelante $\langle g \rangle = 0.9$.

5.9. Parámetro de asimetría espectral (g_λ) de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714.

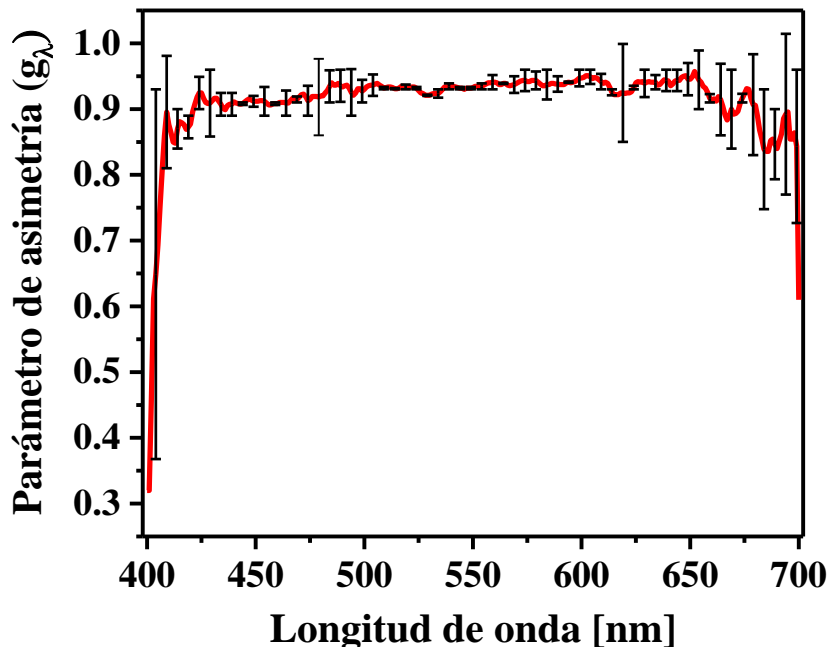


Fig. 31 Valores estimados (error mínimo) del parámetro de asimetría “g” en función de la longitud de onda para la microalga *Chlorella vulgaris*.

En la Figura 31 se observa el comportamiento del parámetro de asimetría (g_λ) en función de la longitud de onda, en un intervalo de 400 a 700 [nm]. Se observa que a valores de longitud de onda de 400 a 415 [nm], el valor de (g_λ) incrementa de 0.35 a 0.9 aproximadamente, después de esta zona el valor del (g_λ) se mantiene entre un valor de 0.85 – 0.9 en un intervalo de 415 a 675 [nm]. Por otra parte, en la última zona que es de 675 a 700 [nm] el valor de (g_λ) presenta cambios, obteniendo valores entre los 0.9 y 0.65. Las barras de error con los valores más altos se encuentran en los extremos, esto puede ser debido a que en esas zonas la emisión de energía proveniente de la fuente es baja, por lo que los valores estimados de (g_λ) no son muy precisos. Además, el parámetro de asimetría presenta baja dependencia de la longitud de onda tal como es portado en la literatura. Finalmente, es notable que el valor promedio de (g_λ) es aproximadamente 0.9 lo cual indica que dispersión de energía provocado por las microalgas es hacia enfrente. Esto comportamiento indica que la cantidad de energía que las microalgas no pueden absorber la dispersan de forma que las demás microalgas dentro del cultivo pueden aprovechar esa energía y poder llevar a cabo sus procesos biológicos. Los resultados reportados de esta propiedad se asemejan a los encontrados en la literatura para otro tipo de microalgas [25].

6. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

El presente trabajo de investigación presentó y utilizó una metodología experimental para la determinación de las propiedades ópticas de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 en un intervalo de 400 a 700 [nm]. Desde el punto de vista experimental, se emplearon dos recipientes (uno esférico y otro cilíndrico) y un espectrofotómetro con un sensor de irradiancia hemisférica. Además, se empleó un enfoque teórico (Ecuación de Transporte de Radiación) para describir el efecto de estos microorganismos en el transporte radiativo. Los resultados experimentales y teóricos fueron integrados mediante un método de Monte Carlo basado en la función de Green de la Ecuación de Transporte.

Los resultados obtenidos demostraron que el diseño y uso de los sistemas experimentales propuestos fue adecuado para medir las diferentes variables macroscópicas observables en el sistema (energía de entrada, transmitida y dispersada total) y como resultado la estimación independiente (y rápida) del coeficiente de extinción, el albedo y el parámetro de asimetría fue exitosa.

En el caso de la determinación experimental del coeficiente de extinción específico promedio, los resultados obtenidos mostraron la independencia respecto a la concentración de biomasa, lo que indica (según teoría radiativa) que el tamaño del aglomerado de las microalgas no está cambiando bajo las condiciones en que se experimentó. Hay reportes que afirman que la aglomeración en microalgas se presenta como un mecanismo de defensa para contrarrestar condiciones adversas (altas intensidades de radiación y ruptura celular provocada por la velocidad del fluido o burbujas) para su crecimiento, algo que evidentemente no ocurrió bajo las condiciones estudiadas. Por otra parte, el coeficiente de extinción específico espectral también muestra independencia de la concentración y una dependencia moderada con respecto a la longitud de onda.

Es importante señalar que las microalgas, al ser partículas con diámetros que rondan los 4-10 μm , desde la perspectiva del espectro solar (longitud de onda 0.4-0.7 μm) se pueden considerar como partículas grandes. Bajo estas condiciones la teoría radiativa aplicable (óptica geométrica) predice que el coeficiente de extinción específico debe ser independiente de la longitud de onda, algo que es congruente con lo observado en este estudio para *Chlorella vulgaris*, pues el coeficiente de extinción presenta variaciones espectrales menores a $\pm 15\%$.

El cálculo del coeficiente de extinción específico se hizo tanto en el recipiente cilíndrico como en el esférico, con resultados prácticamente idénticos. Sin embargo, la determinación experimental del porcentaje de energía dispersada (ϕ) y posteriormente el cálculo del albedo (ω) solo se pudo realizar de manera satisfactoria en el recipiente cilíndrico. El problema reside en que la estimación independiente del albedo depende de poder medir la energía total dispersada, algo que resultó difícil en el arreglo cilíndrico.

Los resultados obtenidos del albedo promedio en el recipiente esférico muestran independencia de la concentración de biomasa a valores de densidad óptica iguales o menores a 1, donde la suposición de independencia es válida (cuando la interacción de los fotones con las partículas en el recipiente se da principalmente por un solo evento de dispersión). Por otra parte, los resultados con respecto al albedo espectral indican que el fenómeno de dispersión es fuertemente dependiente de la longitud de onda. En la figura 28 es notable un valle (pico de absorción) a los 450 [nm] y los 670 [nm]. En contraste, en el intervalo de 500 a 625 [nm] el valor del albedo espectral tiene un valor aproximadamente constante de 0.65 lo que indica que el fenómeno de dispersión domina en esta zona. En general la dependencia espectral del albedo se puede atribuir a las crestas y valles de absorción de los pigmentos (como la *clorofila a* y *b*) presentes en este tipo de microorganismos que en este intervalo de longitud presentan valores absorción muy bajos. Al compararse con otros trabajos (para otras microalgas) se ve que hay congruencia en los resultados obtenidos debido a que muestran un comportamiento similar respecto a las zonas de absorción y dispersión de energía provocado por los pigmentos antes mencionados. Sin embargo, los valores de albedo son diferentes debido a que la cantidad de pigmentos contenida en cada tipo de microalga es diferente.

Finalmente, comparando los resultados experimentales de dispersión a diferentes posiciones angulares con la simulación se demostró que el fenómeno de dispersión provocado por la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 es hacia enfrente tal como se reporta en la literatura [3][25], alrededor de 0.93. Además, resulta claro que este patrón de dispersión (angular) es relativamente insensible a la longitud de onda en la mayor parte del rango visible; creciendo gradualmente de $g = 0.90$ a 0.95 a 450 y 650 [nm], respectivamente. Sin embargo, en los límites del rango visible, el parámetro de asimetría (g) decae rápidamente por debajo de 0.6; este comportamiento en las orillas requiere validarse con otra fuente, debido a que la incertidumbre es muy grande en este rango (asociado a la baja intensidad espectral de la fuente).

Trabajo a futuro.

1. Determinar experimentalmente el campo de absorción de radiación en un fotobiorreactor tipo columna de burbujeo con microalgas en suspensión (*Chlorella vulgaris* UTEX 2714).
2. Emplear las propiedades ópticas de la microalga *Chlorella vulgaris* reportadas en este proyecto para estimar el campo absorción de radiación mediante el método de MCRT en el fotobiorreactor tipo columna de burbujeo y comparar con mediciones experimentales.
3. Determinar las propiedades ópticas de la microalgas *Chlorella vulgaris* utilizando diferentes fuentes de luz.
4. Emplear la metodología desarrollada en el este proyecto para estimar las propiedades ópticas de otros tipos de microalgas.
5. Acoplar el modelo de energía de radiación con un modelo cinético para estimar la tasa fotosintética de un cultivo de microalgas.

7. REFERENCIAS.

- [1] E. Lee, M. Jalalizadeh, and Q. Zhang, “Growth kinetic models for microalgae cultivation: A review,” *Algal Res.*, vol. 12, pp. 497–512, 2015.
- [2] E. Lee, R. L. Heng, and L. Pilon, “Spectral optical properties of selected photosynthetic microalgae producing biofuels,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 114, pp. 122–135, 2013.
- [3] L. Pilon, H. Berberoğlu, and R. Kandilian, “Radiation transfer in photobiological carbon dioxide fixation and fuel production by microalgae,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 112, no. 17, pp. 2639–2660, 2011.
- [4] R. Kandilian, A. Soulies, J. Pruvost, B. Rousseau, J. Legrand, and L. Pilon, “Simple method for measuring the spectral absorption cross-section of microalgae,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 146, pp. 357–368, 2016.
- [5] L. Pottier, J. Pruvost, J. Deremetz, J. F. Cornet, J. Legrand, and C. G. Dussap, “A fully predictive model for one-dimensional light attenuation by *Chlamydomonas reinhardtii* in a torus photobioreactor,” *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 91, no. 5, pp. 569–582, 2005.
- [6] T. M. Mata, A. A. Martins, and N. S. Caetano, “Microalgae for biodiesel production and other applications: A review,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 14, no. 1, pp. 217–232, 2010.
- [7] J. J. Cabello, “Estudio de la actividad de fotosíntesis en respuesta a variables exógenas durante el crecimiento de la microalga *Scenedesmus obtusiusculus* en fotobiorreactores.”. Tesis de doctorado, Universidad Autónoma Metropolitana, 2015.
- [8] I. Rawat, R. Ranjith Kumar, T. Mutanda, and F. Bux, “Biodiesel from microalgae: A critical evaluation from laboratory to large scale production,” *Appl. Energy*, vol. 103, pp. 444–467, 2013.
- [9] C. Safi, B. Zebib, O. Merah, P. Y. Pontalier, and C. Vaca-Garcia, “Morphology, composition, production, processing and applications of *Chlorella vulgaris*: A review,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 35, pp. 265–278, 2014.
- [10] H. Lambers, F. S. Chapin, and T. L. Pons, *Plant physiological ecology: Second edition*. 2008.
- [11] A. Richmond, *Handbook of Microalgal Culture: Biotechnology and Applied Phycology*, vol. 40, no. 5. 2004.
- [12] H. Lambers, F. Stuart Chapin III, and T. L. Pons, *Plant Physiological Ecology*. 2008.
- [13] Contreras Flores, J. M. , Peña castro, and R. O. Cañizares Villanueva, Flores Cotera, “Avances en el diseño conceptual de fotobiorreactores para el cultivo de microalgas,” *Interciencia*, vol. 28, no. 8, pp. 450–456, 2003.

- [14] A. Hernández-Pérez and J. I. Labbé, “Microalgas, cultivo y beneficios,” *Rev. Biol. Mar. Oceanogr.*, vol. 49, no. 2, pp. 157–173, 2014.
- [15] Q. Huang, F. Jiang, L. Wang, and C. Yang, “Design of Photobioreactors for Mass Cultivation of Photosynthetic Organisms,” *Engineering*, vol. 3, no. 3, pp. 318–329, 2017.
- [16] B. Wang, C. Q. Lan, and M. Horsman, “Closed photobioreactors for production of microalgal biomasses,” *Biotechnol. Adv.*, vol. 30, no. 4, pp. 904–912, 2012.
- [17] C. Posten, “Design principles of photo-bioreactors for cultivation of microalgae,” *Eng. Life Sci.*, vol. 9, no. 3, pp. 165–177, 2009.
- [18] H. Takache, J. Pruvost, and H. Marec, “Investigation of light/dark cycles effects on the photosynthetic growth of *Chlamydomonas reinhardtii* in conditions representative of photobioreactor cultivation,” *Algal Res.*, vol. 8, pp. 192–204, 2015.
- [19] Q. Huang, F. Jiang, L. Wang, and C. Yang, “Design of photobioreactors for mass cultivation of photosynthetic organisms,” *Engineering*, vol. 3, no. 3, pp. 318–329, 2017.
- [20] Y. Chisti, “Biodiesel from microalgae,” *Biotechnol. Adv.*, vol. 25, no. 3, pp. 294–306, 2007.
- [21] C. U. Ugwu, H. Aoyagi, and H. Uchiyama, “Influence of irradiance, dissolved oxygen concentration, and temperature on the growth of *Chlorella sorokiniana*,” *Photosynthetica*, vol. 45, no. 2, pp. 309–311, 2007.
- [22] Q. Béchet, A. Shilton, and B. Guieysse, “Modeling the effects of light and temperature on algae growth: State of the art and critical assessment for productivity prediction during outdoor cultivation,” *Biotechnol. Adv.*, vol. 31, no. 8, pp. 1648–1663, 2013.
- [23] J. F. Cornet and C. G. Dussap, “A simple and reliable formula for assessment of maximum volumetric productivities in photobioreactors,” *Biotechnol. Prog.*, vol. 25, no. 2, pp. 424–435, 2009.
- [24] M. F. Modest, *Radiative heat transfer*, Third edit. London: Elsevier, 2013.
- [25] H. Berberoglu, L. Pilon, and A. Melis, “Radiation characteristics of *Chlamydomonas reinhardtii* CC125 and its truncated chlorophyll antenna transformants *tla1*, *tlaX* and *tla1-CW+*,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 22, pp. 6467–6483, 2008.
- [26] J. Pruvost, “Knowledge models for the engineering and optimization of photobioreactors,” in *Microalgal Biotechnology: Potential and Production.*, no. January, Nantes, 2012, p. 45.
- [27] P. J. Valades-Pelayo, J. Moreira, B. Serrano, and H. De Lasa, “Scale-Up Methodology for Bench-Scale Slurry Photocatalytic Reactors Using Combined Irradiation and Kinetic Modelling,” Doctoral dissertation. The University of Western Ontario, 2014.

- [28] J. F. Sacadura, “Thermal radiative properties of complex media: Theoretical prediction versus experimental identification,” *Heat Transf. Eng.*, vol. 32, no. 9, pp. 754–770, 2011.
- [29] S. Bellini, R. Bendoula, E. Latrille, and J. M. Roger, “Potential of a spectroscopic measurement method using adding-doubling to retrieve the bulk optical properties of dense microalgal media,” *Appl. Spectrosc.*, vol. 68, no. 10, pp. 1154–1167, 2014.
- [30] R. Kandilian, R. L. Heng, and L. Pilon, “Absorption and scattering by fractal aggregates and by their equivalent coated spheres,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, vol. 151, pp. 310–326, 2015.
- [31] K. Hannis, “Optical behavior of algae particles in photobioreactors,” . Master Thesis project, TU Delft, 2013.
- [32] A. K. Gaigalas, H. J. He, and L. Wang, “Measurement of absorption and scattering with an integrating sphere detector: Application to microalgae,” *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, vol. 114, no. 2, pp. 69–81, 2009.
- [33] L. A. Ramos Huerta, “Desarrollo de una metodología para la determinación de las propiedades ópticas de fotocatalizadores en suspensión,” . Tesis de maestría, Universidad Autónoma Metropolitana, 2016.
- [34] M. A. Ramirez Cabrera, P. J. Valdes Pelayo, and C. A. Arancibia, “The first order scattering approximation : A closed-form extension to Beer ’ s Law , accurate for moderate to low albedo or optical thickness,” 2020. Artículo en preparación.
- [35] J. R. Mahan, *The Monte Carlo Ray Trace method in radiation heat transfer and applied optics*. Blacksburg, Virginia: ASME Press and John Wiley & Sons Ltd., 2019.

Apéndice A. Curva patrón para determinación de concentración de la microalga *Chlorella vulgaris* UTEX 2714 en medio Bayfolan (1.05 g/mL).

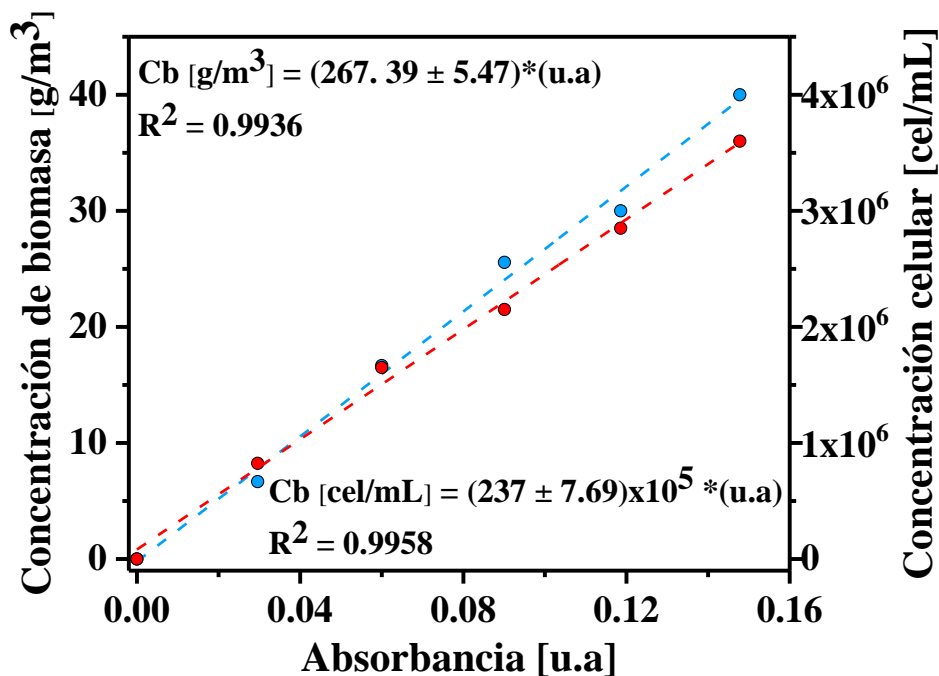


Fig. 32 Curva patrón de absorbancia de *Chlorella vulgaris* UTEX 2714/Bayfolan /1.05 g/mL).

En la Figura 32 se muestra la curva patrón para la determinación de concentración de la microalga *Chlorella vulgaris*. La curva patrón fue elaborada a partir de 5 diferentes muestras a diferentes concentraciones de biomasa, las unidades de absorbancia [u.a] de cada muestra fueron determinadas con un espectrofotómetro de marca: HACH, modelo: DR-6000, a una longitud de onda de 683 [nm] para la curva presentada en unidades de [g/cm³]. Por otra parte, se determinó la concentración celular (mismas muestras empleadas para la elaboración de la primera curva) por medio de la técnica de conteo celular utilizando una cámara de Neubauer (La técnica se describe en la sección 4.3.2).

Apéndice B. Simulaciones de energía transmitida y dispersada a bajas concentraciones de biomasa, empleando el método de MCRT para la estimación del albedo promedio.

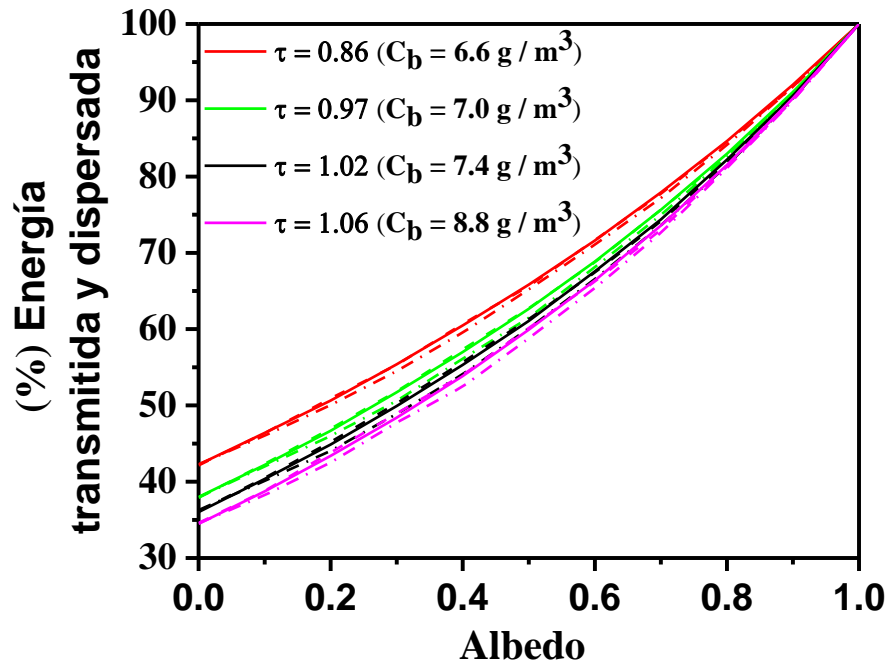


Fig. 33 Simulaciones de energía transmitida y dispersada vs albedo a valores de $\tau \leq 1.06$. Las líneas punteadas son a $g = -1$, intermitentes $g = 1$ y líneas sólidas son un promedio de todo el rango en g . La longitud del dominio es de 8.24 cm.

En la Figura 33 se observan simulaciones que representan la transmisión y dispersión de la energía a través del sistema esférico para el cálculo de propiedades ópticas en función de “ g ” a diferentes valores de la profundidad óptica del medio (τ), para la estimación del (ω) promedio. Para cada valor de (τ) se observan 3 líneas, la línea punteada representa el comportamiento de (φ) cuando ($g = -1$), intermitentes ($g = 1$) y la línea sólida representa el valor promedio de todo el rango de (g) para el valor especificado de (τ).

En todos los casos que se encuentran en el rango de ($\tau = 0.86 - 1.06$) muestran un comportamiento aproximadamente lineal entre la variable experimental (φ) y (ω) e insensibilidad al cambio de “ g ”. Por lo tanto, el uso de concentraciones bajas de biomasa permite trabajar a valores de $\tau \leq 0.1$, lo que lleva a que (φ) y (ω) sean independientes de “ g ” y sea posible poder determinar un valor de (ω) promedio.

Apéndice C. Simulaciones de energía transmitida y dispersada, empleando el método de MCRT para la estimación del albedo espectral.

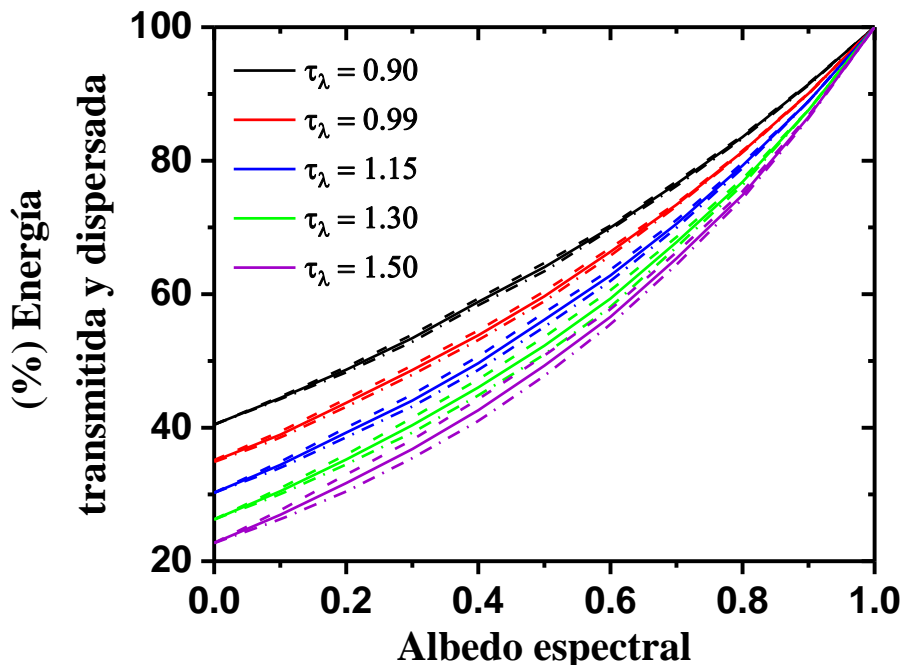


Fig. 34 Simulaciones de energía transmitida y dispersada vs albedo en función de g a diferentes valores de τ_λ . Las líneas punteadas son a $g = -1$, intermitentes $g = 1$ y líneas sólidas son un promedio de todo el rango en g . La longitud del dominio es de 8.24 cm.

En la Figura 34 se observan simulaciones que representan la transmisión y dispersión de la energía por longitud de onda en un intervalo de 400-700 [nm] (φ_λ) a través del sistema esférico para el cálculo de propiedades ópticas en función de “ g ”, en un intervalo de valores de profundidad óptica espectral de ($\tau_\lambda = 0.90 - 1.50$) para la estimación del albedo espectral (ω_λ). Los cinco diferentes perfiles de (φ_λ) están conformados por tres diferentes perfiles los cuales están identificados de la siguiente forma: la línea punteada representa el comportamiento de (φ_λ) cuando ($g = -1$), intermitentes ($g = 1$) y la línea sólida representa el valor promedio de todo el rango de (g) para el valor especificado de τ_λ . Se observa que los perfiles de (φ_λ) son casi iguales a los diferentes valores del parámetro se asimetría, lo cual quiere decir que existe un comportamiento aproximadamente lineal entre la variable experimental (φ) y (ω) e insensibilidad al cambio de (g). Por lo tanto, el uso de concentraciones bajas de biomasa permite trabajar a valores de $\tau \leq 0.1$, lo que lleva a que (φ_λ) y (ω_λ) sean independientes de “ g ” y así poder determinar un valor de (ω_λ).

Apéndice D. Códigos de programación del método de MCRT en Matlab.

Programa (función) en Sistema esférico.

```
function [Tr,Ds,Out,OutScat,Area] = esfera(na,Np,Pot,d,R,Beta,Albedo,g,graph)
% tic
% Variables de entrada

% na= nodos angulares tanto en tetha como en phi.
% Np= número de caminantes.
% Pot= potencia incidente en la esfera, en W.
% d= diámetro del haz.
% R= radio de la esfera, cm.
% Beta= coeficiente de extinción, cm-1.
% Albedo= reflectancia de la partícula.
% g= parámetro de asimetría.
% graph= 1 para graficar, 0 para no hacerlo.

% Variable de salida:

% Tr = energía transmitida, en microW/cm2
% Out= porcentaje de energía que escapa del reactor (transmitida + dispersada).
% OutScat= porcentaje de energía dispersada hacia afuera.

Tr=zeros(na,1);
Ds=zeros(na,1);
t=0:pi/(na-1):pi;
Out=0;
OutScat=0;
for i=1:1:Np
    % Posición y dirección inicial:
    phi=2*pi()*rand();
    Pos=[d*cos(phi),d*sin(phi),-1.1*R];
    Dir=[0,0,1];
    Cond=0;
    counter=0;
    while Cond == 0
        L=zeros(1,3);
        if norm(Pos)<=R
            L(1)=-(1/Beta)*log(rand);
        else
            L(1)=3*R;
        end
        % Calcular distancia con la esfera:
        A=Dir(1)^2+Dir(2)^2+Dir(3)^2;
        B=2*(Dir(1)*Pos(1)+Dir(2)*Pos(2)+Dir(3)*Pos(3));
        C=(Pos(1)^2+Pos(2)^2+Pos(3)^2)-R^2;
```

```

W=(B^2-(4*A*C));%término dentro de la raíz cuadrada;
if W>=0
    L(2)=(-B+sqrt(W))/(2*A);
    L(3)=(-B-sqrt(W))/(2*A);
end
%Seleccionar distancia menor
k=1;
for j=2:1:3
    if L(j)>1E-5 && L(j)<L(k)
        k=j;
    end
end
%Actualizar posición
Pos=Pos+Dir*L(k);
if k>=2
    %Interactúa con la esfera:
    N=-Pos/R;
    PP=Dir(1)*N(1)+Dir(2)*N(2)+Dir(3)*N(3);
    Ref=0;%0.1*(1-PP^2);%modelo simple de reflexión.
    if rand()<Ref
        %Reflexion especular:
        Dir=Dir-2*PP*N;
    end
    PP2=Dir(1)*N(1)+Dir(2)*N(2)+Dir(3)*N(3);
    if PP2<=0
        %fotón sale de la esfera
        Cond=2;
    end
else
    %Interactúa con la partícula en suspensión.
    if rand()<=Albedo
        % dispersión
        % Henyey-Greenstein phase function:
        % p(theta) = (1/2)*(1-g^2)/(1+g^2-2*g*cos(theta))^(3/2);
        if g == 0
            cstet = 2.0*rand() - 1.0;
        else
            gm1 = 1-g;
            gp1 = 1+g;
            cstet = (0.5/g)*(1+g^2 - ((gm1*gp1)/(gp1-2*g*(1-rand())))^2);
        end
        Ai1=2*pi()*rand();%ángulo azimuthal
        Ai2=pi()*rand();%ángulo azimuthal
        f=[cos(Ai1)*sin(Ai2),sin(Ai1)*sin(Ai2),cos(Ai2)];
        PPd=Dir(1)*f(1)+Dir(2)*f(2)+Dir(3)*f(3);
        f=(f-PPd*Dir);
    end
end

```

```

f=f/norm(f);
Dir=cstet*Dir+sqrt(1-cstet^2)*f;
counter=counter+1;
else
    % fotón se absorbe
    Cond=1;
end
end
if norm(Pos)>R*1.05 && Cond==0
    Cond=3;
end
end
if Cond==2
    % Salió de la esfera.
    Tet=acos(-Pos(3)/R);
    % Phi=acos(Pos(1)/sqrt(Pos(1)^2+Pos(2)^2));
    % if Pos(2)<0
    % Phi=2*pi()-Phi;
    % end
    [~,nt]=min((Tet-t).^2);
    % [~,np]=min((Phi-p).^2);
    % conteos:
    Tr(nt)=Tr(nt)+1;
    Out=Out+1;
    if counter>=1
        OutScat=OutScat+1;
        Ds(nt)=Ds(nt)+1;
    end
end
end
Ds=Ds/OutScat;% pasar a fracción de energía.
Out=100*Out/Np;
OutScat=100*OutScat/Np;
% Asignar unidades a transmitancias:
% Tr(:,na)=Tr(:,1)+Tr(:,na);% periodicidad
% Tr(:,1)=Tr(:,na);
Area=zeros(na,1);
for k=1:1:na
    if k==1
        tin=0;
    else
        tin=(t(k-1)+t(k))*0.5;
    end
    if k==na
        tfi=pi;
    else

```

```

    tfi=(t(k+1)+t(k))*0.5;
end
Área(k)=(2*pi*R^2)*(1-cos(tfi)-(1-cos(tin)));%calcular áreas de transferencia.
end
% Calcular Flujo Energético:
for k=1:1:na
    Tr(k)=1e6*Pot*Tr(k)/(Area(k));%microW/cm^2
    Ds(k)=Ds(k)/(Area(k));%microW/cm^2
end
if graph==1
    figure()
    %subplot(1,3,1)
    %plot(t,Area,'-k')
    % [t1,p1]=meshgrid(t,p);
    % mesh(t1,p1,Tr)
    %subplot(1,3,2)
    % Q1=mean(Ds,2);
    %plot(t,Tr,'-k')
    %subplot(1,3,3)
    % Q2=mean(Ds,2);
    %plot(t,Ds,'-k')
    polarplot(t,Ds)
    %xlim([0 pi])

end
%toc

```

Programa principal para el cálculo del albedo (ω)

```

clear
clc

na=5;
Np=1e6;
Pot=1;
d=0;%diámetro del haz.
R=4.12;
gr=0;
% Parámetros a variar:
% Beta=[0,0.0992,0.1120,0.1184,0.1424];
Beta=[0,0.1045,0.1174,0.1239,0.1293];
Albedo=0:0.1:1;
g=-1:0.2:1;
n=size(Beta,2);
m=size(Albedo,2);
l=size(g,2);

```

```

A=zeros(1,m,n);
As=zeros(1,m,n);
tic
for i=1:1:n
    for j=1:1:m
        for k=1:1:l
            clc
            QWERTY=100*((i-1)*m*1+(j-1)*1+k)/(m*n*1);
            disp('porcentaje:')
            disp(QWERTY)
            [q,w,A(k,j,i),As(k,j,i),e] = esfera_P(na,Np,Pot,d,R,Beta(i),Albedo(j),g(k),gr);
        end
    end
end
toc
figure()
subplot(2,6,1)
plot(Albedo,A(1,:,1),Albedo,A(3,:,1),Albedo,A(5,:,1),Albedo,A(7,:,1),Albedo,A(9,:,1),Albedo,A(11,:,1))
ylabel('Energía(%)')
subplot(2,6,2)
plot(Albedo,A(1,:,2),Albedo,A(3,:,2),Albedo,A(5,:,2),Albedo,A(7,:,2),Albedo,A(9,:,2),Albedo,A(11,:,2))
subplot(2,6,3)
plot(Albedo,A(1,:,3),Albedo,A(3,:,3),Albedo,A(5,:,3),Albedo,A(7,:,3),Albedo,A(9,:,3),Albedo,A(11,:,3))
subplot(2,6,4)
plot(Albedo,A(1,:,4),Albedo,A(3,:,4),Albedo,A(5,:,4),Albedo,A(7,:,4),Albedo,A(9,:,4),Albedo,A(11,:,4))
xlabel('Albedo')
ylabel('Energía(%)')
subplot(2,6,5)
plot(Albedo,A(1,:,5),Albedo,A(3,:,5),Albedo,A(5,:,5),Albedo,A(7,:,5),Albedo,A(9,:,5),Albedo,A(11,:,5))
xlabel('Albedo')
subplot(2,6,6)
plot(Albedo,A(1,:,6),Albedo,A(3,:,6),Albedo,A(5,:,6),Albedo,A(7,:,6),Albedo,A(9,:,6),Albedo,A(11,:,6))
xlabel('Albedo')
ylabel('Energía(%)')
subplot(2,6,7)
plot(Albedo,A(1,:,7),Albedo,A(3,:,7),Albedo,A(5,:,7),Albedo,A(7,:,7),Albedo,A(9,:,7),Albedo,A(11,:,7))
xlabel('Albedo')
ylabel('Energía(%)')
subplot(2,6,8)
plot(Albedo,A(1,:,8),Albedo,A(3,:,8),Albedo,A(5,:,8),Albedo,A(7,:,8),Albedo,A(9,:,8),Albedo,A(11,:,8))
xlabel('Albedo')
ylabel('Energía(%)')
subplot(2,6,9)
plot(Albedo,A(1,:,9),Albedo,A(3,:,9),Albedo,A(5,:,9),Albedo,A(7,:,9),Albedo,A(9,:,9),Albedo,A(11,:,9))
xlabel('Albedo')
ylabel('Energía(%)')
B=mean(A,1);
subplot(2,12,[8 12 , 20 24])
plot(Albedo,B(1,:,1),'-m',Albedo,B(1,:,2),'-b',Albedo,B(1,:,3),'-g',Albedo,B(1,:,4),'-y',Albedo,B(1,:,5),'-r')
xlabel('Albedo')
ylabel('Energía transmitida y dispersada (%)')
figure()

```

```

subplot(2,6,1)
plot(Albedo,As(1,:,1),Albedo,As(3,:,1),Albedo,As(5,:,1),Albedo,As(7,:,1),Albedo,As(9,:,1)
,Albedo,As(11,:,1))
ylabel('Energy (%)')
subplot(2,6,2)
plot(Albedo,As(1,:,2),Albedo,As(3,:,2),Albedo,As(5,:,2),Albedo,As(7,:,2),Albedo,As(9,:,2)
,Albedo,As(11,:,2))
subplot(2,6,3)
plot(Albedo,As(1,:,3),Albedo,As(3,:,3),Albedo,As(5,:,3),Albedo,As(7,:,3),Albedo,As(9,:,3)
,Albedo,As(11,:,3))
subplot(2,6,7)
plot(Albedo,As(1,:,4),Albedo,As(3,:,4),Albedo,As(5,:,4),Albedo,As(7,:,4),Albedo,As(9,:,4)
,Albedo,As(11,:,4))
xlabel('Albedo')
ylabel('Energy (%)')
subplot(2,6,8)
plot(Albedo,As(1,:,5),Albedo,As(3,:,5),Albedo,As(5,:,5),Albedo,As(7,:,5),Albedo,As(9,:,5)
,Albedo,As(11,:,5))
xlabel('Albedo')
subplot(2,6,9)

```

```
Bs=mean(As,1);
```

```

subplot(2,12,[8 12 , 20 24])
plot(Albedo,Bs(1,:,1),'-m',Albedo,Bs(1,:,2),'-b',Albedo,Bs(1,:,3),'-g',Albedo,Bs(1,:,4),'-
y',Albedo,Bs(1,:,5),'-r')
xlabel('Albedo')
ylabel('Energía dispersada (%)')

```

Programa para interpolación de beta (β_i) y albedo espectral (ω_i) a partir de datos experimentales.

```

clc
clear
% leer datos:
filename='Phi_hoy.xlsx';
phiE=xlsread(filename,'AD7:AD271');
betE=xlsread(filename,'AG7:AG271');
load('Matriz_MC','A','Beta','Albedo');
phiE=phiE*100;%pasar a porcentaje.
lambda=xlsread(filename,'B7:B271');
load('Matriz_MC_11','B');
%Hacer interpolación lineal de vectores:
n=size(phiE,1);
Alb=zeros(n,2);

```



```

Alb_ave=zeros(n,1);
for i=1:1:n
    %Extremos en g.
    for j=1:1:2
        % Interpolación en Beta:
        d1=round((betE(i)-Beta(1))/0.0175)+1;
        if betE(i)-Beta(d1)>0
            d2=d1+1;
        else
            d2=d1-1;
        end
        %calcular f(albedo) interpolada:
        f=zeros(1,11);
        W=1-abs(betE(i)-Beta(d1))/0.0175;
        for k=1:1:11
            f(k)=A(j,k,d1)*W+A(j,k,d2)*(1-W);
        end
        %interpolación de Albedo:
        [Q1,d1]=min((f-phiE(i)).^2);
        if phiE(i)-f(d1)>0
            d2=d1+1;
        else
            d2=d1-1;
        end
        % Interpolador valor de Albedo:
        W=1-abs(phiE(i)-f(d1))/abs(f(d1)-f(d2));
        Alb(i,j)=Albedo(d1)*W+Albedo(d2)*(1-W);
    end
end

for i=1:1:n
    %Promedio.
    % Interpolación en Beta:
    d1=round((betE(i)-Beta(1))/0.0175)+1;
    if betE(i)-Beta(d1)>0
        d2=d1+1;
    else
        d2=d1-1;
    end
    %calcular f(albedo) interpolada:
    f=zeros(1,11);
    W=1-abs(betE(i)-Beta(d1))/0.0175;
    for k=1:1:11
        f(k)=B(1,k,d1)*W+B(1,k,d2)*(1-W);
    end
    %interpolación de Albedo:

```

```

[Q1,d1]=min((f-phiE(i)).^2);
if phiE(i)-f(d1)>0
    d2=d1+1;
else
    d2=d1-1;
end
% Interpolar valor de Albedo:
W=1-abs(phiE(i)-f(d1))/abs(f(d1)-f(d2));
Alb_ave(i,1)=Albedo(d1)*W+Albedo(d2)*(1-W);
end

R= [Alb(:,1),Alb_ave, Alb(:,2)];

figure()
plot(lambda,R(:,1),'-r',lambda,R(:,2),'-k',lambda,R(:,3),'-r');
title('Phi espectral a [Cb]= 6.2 g/m^3')
xlabel('Longitud de onda [nm]')
ylabel('Albedo espectral')
open R
save('Matriz_R','R','lambda')

```

Programa principal para el cálculo de albedo espectral (ω_λ) a partir de datos experimentales.

```

clear
clc

na=5;
Np=1e6;% .
Pot=1;
d=0;
R=4.12;
gr=0;
% Parámetros a variar:
Beta=0.11:0.0175:0.18;
Albedo=0:0.1:1;
g=-1:2:1;
% g=-1:0.1:1;

n=size(Beta,2);
m=size(Albedo,2);
l=size(g,2);
A=zeros(l,m,n);
As=zeros(l,m,n);
tic

```

```

for i=1:1:n
    for j=1:1:m
        for k=1:1:l
            clc
            QWERTY=100*((i-1)*m*1+(j-1)*1+k)/(m*n*1);
            disp('porcentaje:')
            disp(QWERTY)
            [q,w,A(k,j,i),As(k,j,i),e] = esfera_P(na,Np,Pot,d,R,Beta(i),Albedo(j),g(k),gr);
        end
    end
end
toc

B=mean(A,1);

figure()
for i=1:1:n
    subplot(2,3,i)
    for j=1:1:l
        hold on
        plot(Albedo,A(j,:,i),'-k')
        ylabel('Energía transmitida y dispersada(%)')
        xlabel('Albedo')
    end
end

for i=1:1:n
    subplot(2,3,6)
    hold on
    plot(Albedo,B(1,:,i),'-k')
    xlabel('Albedo')
    ylabel('Energía transmitida y dispersada (%)')
end

save('Matriz_MC','A','Beta','Albedo')
% save('Matriz_MC_11','B')

```

Programas para el cálculo de la función fase.

Programa (función) para estimación del parámetro de asimetría promedio “g”

```
function [Tr,Es,Ih,Out,OutScat,Area,t] = esfera(na,Np,Pot,d,R,Beta,Albedo,g,graph)
% tic
% Variables de entrada
% na= nodos angulares tanto en tetha como en phi.
% Np= número de caminantes.
% Pot= potencia incidente en la esfera, en W.
% d= diámetro del haz.
% R= radio de la esfera, cm.
% Beta= coeficiente de extinción, cm^-1.
% Albedo= reflectancia de la partícula.
% g= parámetro de asimetría.
% graph= 1 para graficar, 0 para no hacerlo.
% nr=10;
% rm=0:R/(nr-1):R;

% Variable de salida:

% Tr energía transmitida, en microW/cm^2
% Out= porcentaje de energía que escapa del reactor (transmitida+dispersada).
% OutScat= porcentaje de energía dispersada hacia afuera.

Tr=zeros(na,1);
Es=zeros(na,1);
Ih=Es;% pasar a fracción de energía.

t=0:pi/(na-1):pi;
% p=0:2*pi/(na-1):2*pi;
Out=0;
OutScat=0;
ni=45;
[x,f_r]=reflectancia_neta(ni);

for i=1:1:Np
    % Posición y dirección inicial:
    phi=2*pi()*rand();
    pr_i=(d/2)*sqrt(rand());
    Pos=[pr_i*cos(phi),pr_i*sin(phi),-1.1*R];
    Dir=[0,0,1];
    Cond=0;
    counter=0;
    while Cond == 0
        L=zeros(1,3);
        if norm(Pos)<R
```

```

L(1)=-(1/Beta)*log(rand);
else
L(1)=3*R;
end
% Calcular distancia con la esfera:
A=Dir(1)^2+Dir(2)^2+Dir(3)^2;
B=2*(Dir(1)*Pos(1)+Dir(2)*Pos(2)+Dir(3)*Pos(3));
C=(Pos(1)^2+Pos(2)^2+Pos(3)^2)-R^2;
W=(B^2-(4*A*C));%termino dentro de la raíz cuadrada;
if W>=0
L(2)=(-B+sqrt(W))/(2*A);
L(3)=(-B-sqrt(W))/(2*A);
end
%Seleccionar distancia menor
k=1;
for j=2:1:3
if L(j)>1E-5 && L(j)<L(k)
k=j;
end
end
%Actualizar posición
Pos=Pos+Dir*L(k);
if k>=2
%Interactúa con la esfera:
N=-Pos/R;
PP=Dir(1)*N(1)+Dir(2)*N(2)+Dir(3)*N(3);
if PP<0
xi=-PP;
[~,B]=min((x-xi).^2);
Ref=f_r(B);
% (xi-x)/
else
Ref=0;%0.1*(1-PP^2);%modelo simple de reflexión.
end
if rand()<Ref
%Reflexion especular:
Dir=Dir-2*PP*N;
end
PP2=Dir(1)*N(1)+Dir(2)*N(2)+Dir(3)*N(3);
if PP2<=0
%foton sale de la esfera
Cond=2;
end
else
%Interactua con la partícula en suspensión.
if rand()<=Albedo

```

```

%dispersión
% Henyey-Greenstein phase function:
%  $p(\theta) = (1/2) * (1-g^2) / (1+g^2-2*g*\cos(\theta))^{3/2}$ ;
if g == 0
    cstet = 2.0*rand() - 1.0;
else
    gm1 = 1-g;
    gp1 = 1+g;
    cstet = (0.5/g)*(1+g^2 - ((gm1*gp1)/(gp1-2*g*(1-rand()))))^2);
end
Ai1=2*pi()*rand();%ángulo azimuthal
Ai2=pi()*rand();%ángulo azimuthal
f=[cos(Ai1)*sin(Ai2),sin(Ai1)*sin(Ai2),cos(Ai2)];
PPd=Dir(1)*f(1)+Dir(2)*f(2)+Dir(3)*f(3);
f=(f-PPd*Dir);
f=f/norm(f);
Dir=cstet*Dir+sqrt(1-cstet^2)*f;
counter=counter+1;
else
    %fotón se absorbe
    Cond=1;
    %rp=norm(Pos);
    %ap=acos(Pos(3)/rp);
    %=min((rp-rm).^2);
    %ABS(
end
end
if norm(Pos)>R*1.05 && Cond==0
    Cond=3;
end
end
if Cond==2
    % Salió de la esfera.
    Tet=acos(Pos(3)/R);
    %Phi=acos(Pos(1)/sqrt(Pos(1)^2+Pos(2)^2));
    %if Pos(2)<0
        % Phi=2*pi()-Phi;
    %end
    [~,nt]=min((Tet-t).^2);
    % [~,np]=min((Phi-p).^2);
    %conteos:
    Tr(nt)=Tr(nt)+1;
    Out=Out+1;
    if counter>=1
        OutScat=OutScat+1;
        Es(nt)=Es(nt)+1;
    end
end

```

```

end
end
end
Es=Es/OutScat;%% pasar a fracción de energía.
Out=100*Out/Np;
OutScat=100*OutScat/Np;
% Asignar unidades a transmitancias:
% Tr(:,na)=Tr(:,1)+Tr(:,na);% periodicidad
% Tr(:,1)=Tr(:,na);
Area=zeros(na,1);
for k=1:1:na
    if k==1
        tin=0;
    else
        tin=(t(k-1)+t(k))*0.5;
    end
    if k==na
        tfi=pi;
    else
        tfi=(t(k+1)+t(k))*0.5;
    end
    Area(k)=(2*pi*R^2)*(1-cos(tfi)-(1-cos(tin)));% calcular áreas de transferencia.
end
% Calcular Flujo Energético:
for k=1:1:na
    Tr(k)=1e6*Pot*Tr(k)/(Area(k));%microW/cm^2
    Ih(k)=Es(k)/(Area(k));%microW/cm^2
end
t=180/pi()*t;
if graph==1
    figure()
    subplot(1,2,1)
    plot(t,Es,'-k')
    axis([0 180 0 0.16])
    subplot(1,2,2)
    plot(t,Ih,'-k')
    axis([0 180 0 0.07])
    %plot(t,Area,'-k')
    % [t1,p1]=meshgrid(t,p);
    % mesh(t1,p1,Tr)
    % subplot(1,3,2)
    % Q1=mean(Ds,2);
    % plot(t,Tr,'-k')
    % subplot(1,3,3)
    % Q2=mean(Ds,2);
    % polarplot(t,Ds)

```

```
%xlim([0 pi])
```

```
end
```

```
%toc
```

Programa para el cálculo de la reflectancia neta

```
function [x,f_r]=reflectancia_neta(ni)
tetha_i=0:(pi/2)/(ni-1):pi/2;

nH2O=1.335;
nPyr=1.475;
nAir=1.000;
R1p=zeros(1,ni);
R2p=zeros(1,ni);
R1n=zeros(1,ni);
%R1p
n1=nH2O;
n2=nPyr;
for i=1:1:ni
    t1=tetha_i(i);
    t2=asin(nH2O/nPyr*sin(t1));
    Rs=((n1*cos(t1)-n2*cos(t2))/(n1*cos(t1)+n2*cos(t2)))^2;
    Rp=((n2*cos(t1)-n1*cos(t2))/(n2*cos(t1)+n1*cos(t2)))^2;
    R1p(i)=(Rs+Rp)/2;
end
%R2p
n1=nPyr;
n2=nAir;
for i=1:1:ni
    t0=tetha_i(i);
    t1=asin(nH2O/nPyr*sin(t0));
    if n1/n2*sin(t1)<=1
        t2=asin(n1/n2*sin(t1));
        Rs=((n1*cos(t1)-n2*cos(t2))/(n1*cos(t1)+n2*cos(t2)))^2;
        Rp=((n2*cos(t1)-n1*cos(t2))/(n2*cos(t1)+n1*cos(t2)))^2;
        R2p(i)=(Rs+Rp)/2;
    else
        R2p(i)=1;
    end
end
%R1n
n1=nPyr;
n2=nH2O;
for i=1:1:ni
    t0=tetha_i(i);
```



```

t1=asin(nH2O/nPyr*sin(t0));
if n1/n2*sin(t1)<=1
    t2=asin(n1/n2*sin(t1));
    Rs=((n1*cos(t1)-n2*cos(t2))/(n1*cos(t1)+n2*cos(t2)))^2;
    Rp=((n2*cos(t1)-n1*cos(t2))/(n2*cos(t1)+n1*cos(t2)))^2;
    R1n(i)=(Rs+Rp)/2;
else
    R1n(i)=1;
end
end
x=cos(tetha_i);
f_r=1-((1-R2p).*(1-R1p)./(1-R1n.*R2p));

```

Programa principal para la estimación del parámetro de asimetría promedio “g”

```

clear
clc

na=13;
Np=1e6;
Pot=1;
d=0.4;
R=4.12;
gr=0;
% Parámetros a variar:
nc=2;
Beta=0.11:0.07/(nc-1):0.18;
Albedo=0.31:0.66/(nc-1):0.97;
%g=-1:2:1;
g=-0.9:0.45:0.9;

n=size(Beta,2);
m=size(Albedo,2);
l=size(g,2);
Es=zeros(na,l,m,n);
Ih=zeros(na,l,m,n);
tic
for i=1:1:n %Beta
    for j=1:1:m %Albedo
        for k=1:1:l % g función de fase.
            clc
            QWERTY=100*((i-1)*m*1+(j-1)*1+k)/(m*n*1);
            disp('porcentaje:')
            disp(QWERTY)
            [q,Es(:,k,j,i),Ih(:,k,j,i),A,As,Area,t] =
esfera(na,Np,Pot,d,R,Beta(i),Albedo(j),g(k),gr);

```

```

    end
  end
end
toc
c=jet(1);
E_N=Es(2:na-1, :, :);
figure()
for k=1:1:l
    Q3=[c(k,1),c(k,2),c(k,3)];
    for i=1:1:n
        % subplot(2,3,i)
        for j=1:1:m
            E_N(:,k,j,i)=Es(2:(na-1),k,j,i)/sum(Es(2:(na-1),k,j,i));
            hold on
            plot(t(2:na-1),E_N(:,k,j,i),'color',Q3)
            ylabel('PDF Energy Transmitted (fracc.)')
            xlabel('Angle')
        end
    end
end
end
% Datos experimentales
Exp1=[0.54, 0.13, 0.13, 0.05, 0.04, 0.03, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.01];
A=15:15:165; % Ángulo (posición del sensor)
hold on
% plot(A,Exp1,'ok',A,Exp2,'or',A,Exp3,'ob')
plot(A,Exp1,'ok')
E_m=zeros(na-2,1);
for k=1:1:(na-2)
    for j=1:1:l
        E_m(k,j)=mean(mean(E_N(k,j, :, :)));
    end
end
end
figure()
for j=1:1:l
    Q3=[c(j,1),c(j,2),c(j,3)];
    hold on
    plot(t(2:na-1),E_m(:,j),'color',Q3)
    ylabel('Energía dispersada y transmitida (fracc.)')
    xlabel('Ángulo')
end
end
hold on
% plot(A,Exp1,'ok',A,Exp2,'or',A,Exp3,'ob')
plot(A,Exp1,'ok')

```

Cálculo del parámetro de asimetría “g” de forma espectral.

Programa principal para estimación del parámetro de asimetría espectral “g_i”

```

clear
clc

na=13;
Np=1e6;
Pot=1;
d=0.4;
R=4.12;
gr=0;
% Parámetros a variar:
nc=2;
Beta=0.11:0.07/(nc-1):0.18;
Albedo=0.39:0.46/(nc-1):0.85;
g=-0.9:0.45:0.9;

n=size(Beta,2);
m=size(Albedo,2);
l=size(g,2);
Es=zeros(na,l,m,n);
Ih=zeros(na,l,m,n);
tic
for i=1:1:n %Beta
    for j=1:1:m %Albedo
        for k=1:1:l % g funcion de fase.
            clc
            QWERTY=100*((i-1)*m*l+(j-1)*l+k)/(m*n*l);
            disp('porcentaje:')
            disp(QWERTY)
            [q,Es(:,k,j,i),Ih(:,k,j,i),A,As,Area,t] =
esfera(na,Np,Pot,d,R,Beta(i),Albedo(j),g(k),gr);
        end
    end
end
toc
c=jet(l);
E_N=Es(2:na-1,:,:,);
figure()
for k=1:1:l
    Q3=[c(k,1),c(k,2),c(k,3)];
    for i=1:1:n
        % subplot(2,3,i)
        for j=1:1:m
            E_N(:,k,j,i)=Es(2:(na-1),k,j,i)/sum(Es(2:(na-1),k,j,i));
        end
    end
end

```

```

        hold on
        plot(t(2:na-1),E_N(:,k,j,i),'color',Q3)
        ylabel('Energía Transmitida (fracc.)')
        xlabel('Angle')
    end
end
end
E_m=zeros(na-2,1);
for k=1:1:(na-2)
    for j=1:1:l
        E_m(k,j)=mean(mean(E_N(k,j, :, :)));
    end
end
figure()
for j=1:1:l
    Q3=[c(j,1),c(j,2),c(j,3)];
    hold on
    plot(t(2:na-1),E_m(:,j),'color',Q3)
    ylabel('Energía Transmitida (fracc.)')
    xlabel('Angle')
end

save('Estimar','g','E_m')

```

Programa para el cálculo de valor mínimo de “ g_λ ” a partir de datos experimentales.

```

clear
clc
load('Estimar')
% A=readmatrix('Intensidades_Calculo_g.xlsx','Sheet','Datos','Range','BL107:BX407');
A=xlsread('Intensidades_Calculo_g.xlsx','Datos','BL107:BX407');
Exp=A(:,3:13);
lambda=A(:,1);

nl=size(Exp,1);
ng=size(g,2);

g_min=zeros(nl,1);
E=zeros(nl,ng);

for k=1:1:nl
    for j=1:1:ng
        for i=1:1:11
            E(k,j)=(Exp(k,i)-E_m(i,j))^2+E(k,j);
        end
        E(k,j)=sqrt(E(k,j));
    end
end

```

```
end
end

c = jet(nl);
figure()
for i=1:1:3
    for k=(1+100*(i-1)):1:(100*(i-1)+101)
        subplot(3,2,1+2*(i-1))
        plot(g,E(k,:), 'color',[c(k,1),c(k,2),c(k,3)])
        hold on
    end
end
end
% seleccionar el valor mínimo de g:
for k=1:1:nl
    [q1,q2]=min(E(k,:));
    g_min(k,1)=g(q2);
end
subplot(1,2,2)
plot(lambda,g_min, '-k')
```



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00140

Matricula: 2173802109

Desarrollo de una metodología para la caracterización de los fenómenos de transporte radiativo en un cultivo de microalgas.



LUIS ANGEL CASTILLO CRUZ
ALUMNO

REVISÓ

MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

Con base en la Legislación de la Universidad Autónoma Metropolitana, en la Ciudad de México se presentaron a las 14:00 horas del día 28 del mes de agosto del año 2020 POR VÍA REMOTA ELECTRÓNICA, los suscritos miembros del jurado designado por la Comisión del Posgrado:

- DR. CARLOS OMAR CASTILLO ARAIZA
- DR. JESUS FABRICIO GUAYAQUIL SOSA
- DRA. ALMA LILIA TOLEDO CERVANTES
- DR. JUAN JOSE CABELLO ROBLES

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRO EN CIENCIAS (INGENIERIA QUIMICA)

DE: LUIS ANGEL CASTILLO CRUZ

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

APROBAR

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE

DR. CARLOS OMAR CASTILLO ARAIZA

VOCAL

DR. JESUS FABRICIO GUAYAQUIL SOSA

VOCAL

DRA. ALMA LILIA TOLEDO CERVANTES

SECRETARIO

DR. JUAN JOSE CABELLO ROBLES