

REVISTA
DE LA

ACADEMIA
DE
CIENCIAS

Exactas
Físicas
Químicas y
Naturales

DE
ZARAGOZA



Serie 2^a

Volumen 43

1988

INDICE DE MATERIAS

	<i>Págs.</i>
A. Vera López y J. Sangróniz. — «Clasificación de todos los holomorfos relativos de un grupo abeliano de tipo $C_4 \times C_4$ »	7
A. Vera López y J. Sangróniz. — «Un algoritmo para calcular el vector conjugación de un grupo»	13
L. M. Fernández. — «On totally geodesic invariant submanifolds of an S-manifold»	23
A. Márquez. — «Uniformly continuous proper ends»	31
J. R. Gómez. — «Central sequence of lie algebras»	37
J. I. Extremiana, L. J. Hernández y M. T. Rivas. — «Obstrucciones propias de tipo compacto-no compacto I»	47
J. I. Extremiana, L. J. Hernández y M. T. Rivas. — «Obstrucciones propias de tipo compacto-no compacto II»	65
S. Rodríguez. — «Homotopía en categorías aditivas»	77
I. K. Argyros. — «A global theorem for the solutions of polynomial equations»	93
I. K. Argyros. — «Vietta-Like relations in banach space»	103
R. Cid y S. Ferrer. — «On the derivatives of Hansen's coefficients in Delaunay variables»	109
A. Abad y M. Sein-Echaluce. — «Manipuladores algebraicos en mecánica celeste»	117
J. M. Franco y M. Palacios. — «Estabilidad orbital de métodos lineales multipaso de tipo Cowell»	129
J. M. Franco y M. Palacios. — «Estabilidad absoluta de métodos lineales multipaso de tipo Cowell»	145
F. J. Serón, F. J. Sanz, M. Kindelán y J. I. Badal. — «Cálculo eficiente de las soluciones de las ecuaciones de la elastodinámica lineal con procesadores escalares y vectoriales»	163
M. C. López, M. A. Gallardo, J. S. Urieta y C. Gutiérrez Losa. — «Solubilidades de gases no polares en clorobenceno y bromobenceno desde 263,15 a 303,15 K y a la presión parcial del gas de 101,32 kPa»	183
M. C. López, M. A. Gallardo, J. S. Ureta y C. Gutiérrez Losa. — «Solubilidades de los gases nobles en clorobenceno y bromobenceno entre 263,15 K y 303,15 K y a la presión parcial del gas de 101,32 kPa»	191
P. Pérez, M. Gracia y C. Gutiérrez Losa. — « H_m^E y V_m^E de mezclas binarias 1-bromobutano + n-alcohol»	201
P. Pérez, M. Gracia y C. Gutiérrez Losa. — « H_m^E y V_m^E de mezclas binarias 1-yodobutano + n-alcohol»	207
J. A. Sánchez, F. J. Martínez, J. L. De Miguel y J. San Román. — «Los acuíferos carbonatados del macizo de Guara, análisis e interpretación de las curvas de recesión de caudales de los ríos que lo drenan»	213
L. F. Auqué, J. Fernández, J. M. Tena, M. J. Gimeno, J. Mandado y P. Tolosa. — «Influencia de las condiciones de medida de pH en el cálculo de la distribución de especies en equilibrio de un sistema acuoso natural»	223
F. Alberto y A. Navas. — «Incidencia de la textura en la velocidad de disolución de rocas yesíferas»	233
F. Alberto y A. Navas. — «Escorrentías superficiales producidas sobre suelos yesíferos sometidos a lluvia simulada»	243
H. Marco. — «Estudio ecológico del río Huecha»	257
H. Marco. — «Contribución a la algología del curso inferior del río Gállego»	285
J. L. Viviente. — Breve informe sobre el coloquio «Mathematiques à venir. Quels mathématiciens pour l'an 2000?»	303

CLASIFICACION DE TODOS LOS HOLOMORFOS RELATIVOS DE UN GRUPO ABELIANO DE TIPO $C_4 \times C_4$ (*)

A. VERA LÓPEZ Y J. SANGRÓNIZ

Departamento de Matemáticas. Facultad de Ciencias.

Universidad del País Vasco. Apartado 644. BILBAO (España).

In this paper, we classify the 53 relative holomorphs of an abelian group of type $C_4 \times C_4$. For each of these groups we give the number of conjugacy classes and the conjugacy vector.

INTRODUCCION

En lo que sigue, G denotará un grupo finito y $r(G)$ el número de clases de conjugación de G . Si S es un subconjunto no vacío de G , $r_G(S)$ es el número de clases de conjugación de G que tienen intersección no vacía con S . Si $\{g_1, \dots, g_t\}$ es un sistema completo de representantes de las clases de conjugación de G que cortan a S , ordenado de manera que $|C_G(g_1)| \geq \dots \geq |C_G(g_t)|$, definimos el vector $\Delta_S^G = (|C_G(g_1)|, \dots, |C_G(g_t)|)$. La r -tupla $\Delta_G^G = \Delta_G^G$ se llama vector conjugación de G . En orden a simplificar la notación escribiremos $\Delta_S^G = (a_1^{n_1}, \dots, a_t^{n_t})$ en lugar de $\Delta_S^G = (a_1, \dots, a_1, \dots, a_t, \dots, a_t)$. $\beta(G)$ denota el número de distintos subgrupos normales minimales de G , $S(G)$ es el zócalo de G , es decir, el subgrupo producto de todos los subgrupos normales minimales de G , y, $\alpha(G)$ denotará el número de clases de conjugación de G no contenidas en $S(G)$.

Cuando se estudia el problema de la clasificación de los grupos finitos con un número dado de clases de conjugación, han de analizarse frecuentemente, ciertas secciones del grupo que resultan ser holomorfos relativos de algunos grupos abelianos de orden bajo. En este sentido y, para simplificar estos cálculos resulta de gran interés el disponer de la clasificación completa de todos los

(*) Este trabajo ha sido subvencionado por la Universidad del País Vasco.

holomorfos relativos de estos grupos, así como de los invariantes mencionados anteriormente. A. Vera y L. Ortiz de Elguea obtienen en [1] todos los holomorfos relativos de un grupo abeliano elemental de orden 16. En este trabajo, determinamos todos los holomorfos relativos de un grupo abeliano de tipo $C_4 \times C_4$. Además, para cada uno de ellos se obtiene el valor de los invariantes $r(G)$, Δ_G , $\beta(G)$ y $\alpha(G)$.

Consideremos los siguientes automorfismos del grupo $\langle x, y \rangle \cong C_4 \times C_4$:

$$\begin{aligned} x^{\alpha_1} &= x^{-1}, & x^{\alpha_2} &= x^{-1}y^2, & x^{\alpha_3} &= x^{-1}, & x^{\alpha_4} &= x, & x^a &= y, & x^b &= x, \\ y^{\alpha_1} &= y^{-1}, & y^{\alpha_2} &= y^{-1}, & y^{\alpha_3} &= x^2y^{-1}, & y^{\alpha_4} &= y^{-1}, & y^a &= x^{-1}y^{-1}, & y^b &= x^{-1}y^{-1}. \end{aligned}$$

Se tiene que $\text{Aut}(C_4 \times C_4) = \langle \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 \rangle \rtimes_\lambda \langle a, b \rangle \cong C_2^4 \rtimes_\lambda \Sigma_3$ con la acción λ dada por:

$$\begin{aligned} \alpha_1^a &= \alpha_1, & \alpha_2^a &= \alpha_2\alpha_3, & \alpha_3^a &= \alpha_2, & \alpha_4^a &= \alpha_2\alpha_4 \\ \alpha_1^b &= \alpha_1, & \alpha_2^b &= \alpha_2\alpha_3, & \alpha_3^b &= \alpha_3, & \alpha_4^b &= \alpha_1\alpha_3\alpha_4 \end{aligned}$$

Para determinar todos los holomorfos relativos de $C_4 \times C_4$ se obtiene primero un sistema completo de representantes de las clases de conjugación de subgrupos de $\text{Aut}(C_4 \times C_4)$. Para cada uno de estos subgrupos K , se obtiene el correspondiente holomorfo relativo $\text{Hol}(C_4^2, K)$. Finalmente, se determina cuáles de estos grupos son isomorfos.

El cálculo del vector conjugación y del número de clases de conjugación de cada uno de los grupos obtenidos se hace utilizando el Lema 2.11 de [2], en el que se determina Δ_G para los productos semidirectos $G = N \rtimes_\lambda K$ con N abeliano. En este mismo trabajo pueden encontrarse ejemplos de la utilización de este Lema.

Cuando se conoce una presentación de un grupo finito G , es posible obtener, teóricamente, el vector conjugación de G utilizando métodos computacionales. Este procedimiento no es adecuado cuando el número de generadores y relaciones es elevado. Sin embargo, cuando G es un producto semidirecto de un subgrupo normal abeliano N por un grupo arbitrario H , el problema puede reducirse a determinar el vector conjugación del subgrupo H . De hecho, la tabla II se ha obtenido también mediante un ordenador utilizando un programa escrito específicamente para el caso mencionado.

TEOREMA: Sea $G = \text{Hol}(C_4 \times C_4, K)$ con $K \leq \text{Aut}(C_4 \times C_4)$. Entonces, G es isomorfo a alguno de los grupos $G_i = \text{Hol}(C_4 \times C_4, K_i)$, $1 \leq i \leq 53$, donde K_i es uno de los grupos de la siguiente tabla:

TABLA I

$K_1 = \langle \alpha_1 \rangle \cong C_2$	$K_{26} = \langle \alpha_1, \alpha_2 b \rangle \cong C_2 \times C_4$
$K_2 = \langle \alpha_2 \rangle \cong C_2$	$K_{27} = \langle \alpha_1, \alpha_4 b \rangle \cong C_2 \times C_4$
$K_3 = \langle \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \rangle \cong C_2$	$K_{28} = \langle \alpha_1, \alpha_3, b \rangle \cong C_2 \times C_2 \times C_2$
$K_4 = \langle b \rangle \cong C_2$	$K_{29} = \langle \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \rangle \cong C_2 \times C_2 \times C_2$
$K_5 = \langle \alpha_4 \rangle \cong C_2$	$K_{30} = \langle \alpha_1, \alpha_2, \alpha_4 \rangle \cong C_2 \times C_2 \times C_2$
$K_6 = \langle \alpha_1 \alpha_2 \rangle \cong C_2$	$K_{31} = \langle \alpha_1 \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 \rangle \cong C_2 \times C_2 \times C_2$
$K_7 = \langle a \rangle \cong C_3$	$K_{32} = \langle \alpha_2 b, \alpha_2 \rangle \cong D_8$
$K_8 = \langle \alpha_2 b \rangle \cong C_4$	$K_{33} = \langle \alpha_2 \alpha_4 b, \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \rangle \cong D_8$
$K_9 = \langle \alpha_2 \alpha_4 b \rangle \cong C_4$	$K_{34} = \langle \alpha_2 b, \alpha_1 \alpha_2 \rangle \cong D_8$
$K_{10} = \langle \alpha_4 b \rangle \cong C_4$	$K_{35} = \langle \alpha_2 \alpha_4 b, \alpha_2 \alpha_4 \rangle \cong D_8$
$K_{11} = \langle \alpha_1 \alpha_3, b \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{36} = \langle \alpha_4 b, \alpha_4 \rangle \cong D_8$
$K_{12} = \langle \alpha_4, \alpha_2 \alpha_3 \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{37} = \langle \alpha_1, \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 a \rangle \cong C_2 \times C_6$
$K_{13} = \langle \alpha_1, \alpha_2 \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{38} = \langle \alpha_1 \rangle \times \langle a, b \rangle \cong C_2 \times \Sigma_3$
$K_{14} = \langle \alpha_1, \alpha_4 \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{39} = \langle \alpha_1 a, \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 b \rangle \cong DC_3$
$K_{15} = \langle \alpha_3, \alpha_4 \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{40} = \langle \alpha_3, \alpha_2, a \rangle \cong A_4$
$K_{16} = \langle \alpha_4, \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{41} = \langle \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 \rangle \cong C_2 \times C_2 \times C_2 \times C_2$
$K_{17} = \langle \alpha_1, \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{42} = \langle \alpha_1 \rangle \times \langle \alpha_4 b, b \rangle \cong C_2 \times D_8$
$K_{18} = \langle \alpha_2, \alpha_3 \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{43} = \langle \alpha_1 \rangle \times \langle \alpha_2 b, b \rangle \cong C_2 \times D_8$
$K_{19} = \langle \alpha_4, \alpha_1 \alpha_3 \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{44} = \langle \alpha_4 b, \alpha_3, \alpha_2 \rangle \cong [C_4 \times C_2] C_2$
$K_{20} = \langle \alpha_4, \alpha_1 \alpha_2 \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{45} = \langle \alpha_2 b, \alpha_1 \alpha_3, \alpha_4 \rangle \cong [C_4 \times C_2] C_2$
$K_{21} = \langle \alpha_1, b \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{46} = \langle \alpha_3, \alpha_2, a, b \rangle \cong \Sigma_4$
$K_{22} = \langle \alpha_3, b \rangle \cong C_2 \times C_2$	$K_{47} = \langle a, \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 b, \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \rangle \cong [C_3] D_8$
$K_{23} = \langle \alpha_1 a \rangle \cong C_6$	$K_{48} = \langle \alpha_1 \rangle \times \langle \alpha_3, \alpha_2, a \rangle \cong C_2 \times A_4$
$K_{24} = \langle \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 a \rangle \cong C_6$	$K_{49} = \langle \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, b \rangle \cong [C_2 \times C_2 \times C_2 \times C_2] C_2$
$K_{25} = \langle a, b \rangle \cong \Sigma_3$	$K_{50} = \langle \alpha_1 \rangle \times \langle \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \rangle \times \langle \alpha_3, \alpha_2, a \rangle \cong C_2 \times C_2 \times A_4$

$$\begin{aligned}
K_{51} &= \langle \alpha_1 \rangle \times \langle \alpha_3, \alpha_2, a, b \rangle \approx C_2 \times \Sigma_4 \\
K_{52} &= \langle \alpha_3, \alpha_2, a, \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 b \rangle \approx [C_2 \times C_2] DC_3 \\
K_{53} &= \langle \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, a, b \rangle \approx [C_2 \times C_2 \times C_2 \times C_2] \Sigma_3
\end{aligned}$$

Los valores de $r(G)$, Δ_G , $\beta(G)$ y $\alpha(G)$ para cada uno de los holomorfos G_i vienen dados en la tabla siguiente:

TABLA II

i	$r(G)$	Δ_G	$\beta(G)$	$\alpha(G)$
1	14	$(32^4, 16^6, 8^4)$	3	10
2	14	$(32^4, 16^6, 8^4)$	3	10
3	14	$(32^4, 16^6, 8^4)$	3	10
4	14	$(32^4, 16^6, 8^4)$	1	12
5	20	$(32^8, 16^{12})$	3	16
6	20	$(32^8, 16^{12})$	3	16
7	8	$(48, 16^5, 3^2)$	1	6
8	13	$(64^2, 32, 16^5, 8^5)$	1	11
9	13	$(64^2, 32, 16^5, 8^5)$	1	11
10	22	$(64^4, 32^6, 16^{12})$	1	20
11	22	$(64^4, 32^6, 16^{12})$	1	20
12	22	$(64^4, 32^6, 16^{12})$	3	18
13	22	$(64^4, 32^6, 16^{12})$	3	18
14	25	$(64^4, 32^{12}, 16^9)$	3	21
15	25	$(64^4, 32^{12}, 16^9)$	3	21
16	25	$(64^4, 32^{12}, 16^9)$	3	21
17	19	$(64^4, 16^{15})$	3	15

i	r(G)	Δ_G	$\beta(G)$	$\alpha(G)$
18	19	$(64^4, 16^{15})$	3	15
19	28	$(64^8, 32^{12}, 16^8)$	3	24
20	34	$(64^4, 32^{30})$	3	30
21	16	$(64^2, 32^3, 16^8, 8^3)$	1	14
22	16	$(64^2, 32^3, 16^8, 8^3)$	1	14
23	10	$(96, 32, 24, 16^2, 8, 6^4)$	1	8
24	10	$(96, 32, 24, 16^2, 8, 6^4)$	1	8
25	10	$(96, 32^3, 16, 8^4, 3)$	1	8
26	23	$(128^2, 64^3, 32^6, 16^{12})$	1	21
27	29	$(128^2, 64^7, 32^{12}, 16^8)$	1	27
28	29	$(128^2, 64^7, 32^{12}, 16^8)$	1	27
29	38	$(128^4, 64^6, 32^{28})$	3	34
30	44	$(128^4, 64^{18}, 32^{22})$	3	40
31	44	$(128^4, 64^{18}, 32^{22})$	3	40
32	17	$(128^2, 64, 32^3, 16^8, 8^3)$	1	15
33	17	$(128^2, 64, 32^3, 16^8, 8^3)$	1	15
34	20	$(128^2, 64, 32^9, 16^5, 8^3)$	1	18
35	20	$(128^2, 64, 32^9, 16^5, 8^3)$	1	18
36	26	$(128^4, 64^6, 32^4, 16^{12})$	1	24
37	17	$(192, 64, 48^3, 16^4, 12^8)$	1	15
38	14	$(192, 64, 48, 32^2, 16^5, 8^2, 6^2)$	1	12
39	11	$(192, 64, 48, 16^2, 8^4, 6^2)$	1	9
40	9	$(192, 64, 16^5, 3^2)$	1	7
41	76	$(256^4, 128^{18}, 64^{54})$	3	71
42	40	$(256^2, 128^7, 64^{10}, 32^{17}, 16^4)$	1	38
43	34	$(256^2, 128^3, 64^8, 32^{15}, 16^6)$	1	32

i	r(G)	Δ_G	$\beta(G)$	$\alpha(G)$
44	34	$(256^2, 128^3, 64^8, 32^{15}, 16^6)$	1	32
45	34	$(256^2, 128^3, 64^{12}, 32^9, 16^8)$	1	32
46	12	$(384, 128, 32^3, 16^3, 8^3, 3)$	1	10
47	16	$(384, 128, 96, 48, 32^2, 16^3, 12^4, 8^3)$	1	14
48	18	$(384, 128, 96, 64^2, 32^9, 6^4)$	1	16
49	53	$(512^2, 256^3, 128^{14}, 64^{24}, 32^4, 16^6)$	1	51
50	36	$(768, 256, 192^3, 128^6, 64^{17}, 12^8)$	1	34
51	24	$(768, 256, 192, 128^2, 64^5, 32^6, 16^6, 6^2)$	1	22
52	24	$(768, 256, 192, 128^2, 64^5, 32^6, 16^6, 6^2)$	1	22
53	33	$(1536, 512, 384, 256^2, 192, 128^7, 64^6, 32^4, 16^6, 12^4)$	1	31

BIBLIOGRAFIA

- [1] A. VERA LOPEZ, L. ORTIZ DE ELGUEA. "The conjugacy vectors of all relative holomorphs of an elementary abelian group of order 16". Por aparecer.
- [2] A. VERA LOPEZ, J. VERA LOPEZ. "Classification of finite groups according to the number of conjugacy classes". Israel J. Math. 51 p. 305-338 (1985).

UN ALGORITMO PARA CALCULAR EL VECTOR CONJUGACION DE UN GRUPO(*)

A. VERA LÓPEZ Y J. SANGRÓNIZ

Departamento de Matemáticas. Facultad de Ciencias.
Universidad del País Vasco. Apartado 644. BILBAO (España).

In this paper, we give an algorithm for the calculation of the conjugacy vector of a finite group which is a semidirect product of an abelian group and an arbitrary finite group. We also give some examples which illustrate our results.

1. INTRODUCCION

El cálculo del número de clases de conjugación y del vector conjugación de un grupo es, en general, un problema de difícil solución. En [1] y [2] pueden encontrarse resultados que resuelven teóricamente esta cuestión para ciertos tipos de grupos, aunque, en algunos casos, los cálculos que se exigen son largos y tediosos. En este trabajo, se expone un algoritmo que permite obtener el vector conjugación de un grupo presentado mediante generadores y relaciones. La ejecución efectiva de este algoritmo está en función de la complejidad de las relaciones que definen el grupo y de la capacidad del ordenador disponible. No obstante, en algunos de los casos estudiados en los artículos anteriormente citados, este algoritmo puede modificarse de forma que su implementación en un microordenador permitirá obtener el vector conjugación de muchos grupos en los que un cálculo directo requeriría un gran trabajo.

(*) Este trabajo ha sido subvencionado por la Universidad del País Vasco.

2. EL CALCULO DEL VECTOR CONJUGACION DE UN GRUPO

En lo que sigue, G denotará un grupo finito. Supongamos que $G = \langle X | R \rangle$ siendo $X = \{x_1, \dots, x_l\}$ un conjunto de generadores del grupo y, $R = \{r_i(x_1, \dots, x_l) = 1, i=1, \dots, l\}$ un conjunto de relaciones entre los generadores x_1, \dots, x_l que definen el grupo.

El cálculo del vector conjugación del grupo G se reduce, esencialmente, a la resolución de los dos problemas siguientes:

1) El problema de la enumeración de los elementos de G , es decir, expresar cada elemento del grupo como producto de generadores e inversos de los generadores.

2) Determinar un algoritmo que permita obtener las clases de conjugación del grupo realizando el menor número posible de operaciones.

El primer problema queda resuelto mediante el conocido Método de la Enumeración de las Coclases de Todd y Coxeter. Una exposición de este método puede encontrarse, por ejemplo, en [3]. El Algoritmo de Todd-Coxeter permite obtener una matriz $T(i, j)$ de n filas y m columnas, donde $n = |G|$, $m = |XUX^{-1}|$, de forma que, si $XUX^{-1} = \{z_1, \dots, z_m\}$ con $z_i = x_i$ para $1 \leq i \leq t$, se tiene una enumeración de los elementos de G , $g_1 = 1, g_2, \dots, g_n$ verificando las dos propiedades fundamentales siguientes:

i) Para cualesquiera i y k con $1 \leq i \leq n$, $1 \leq k \leq m$ se tiene:

$$g_i z_k = g_{T(i,k)}.$$

ii) Para todo i con $2 \leq i \leq n$, existen $j < i$ y k con $1 \leq k \leq m$ tales que:

$$g_i = g_j z_k.$$

Aplicando reiteradamente la propiedad ii) se puede obtener la descomposición de cada elemento de G como producto de generadores y de inversos de generadores del grupo. Estas dos propiedades permiten realizar operaciones sobre los elementos del grupo inductivamente. Supongamos, por ejemplo, que dado $x \in XUX^{-1}$ se desean obtener los elementos g^x para todo elemento g del grupo. Se tiene que $g_1^x = g_1$. Para $i > 1$, $g_i = g_j z_k$, con $j < i$ y $z_k \in XUX^{-1}$, por tanto, $g_i^x = g_j^x x^{-1} z_k x$. Como $j < i$, podemos suponer que el elemento g_j^x ya es conocido de forma que, g_i^x queda fácilmente determinado aplicando i). Suponiendo que $x = z_r$ y $x^{-1} = z_s$, podemos esquematizar este método en el siguiente algoritmo:

ALGORITMO 1

CONJ(1) = 1
$i = 2, \dots, G $
$g_i = g_j z_k, j < i, z_k \in XUX^{-1}$ $CONJ(i) \leftarrow CONJ(j)$ $CONJ(i) \leftarrow T(CONJ(i), s)$ $CONJ(i) \leftarrow T(CONJ(i), k)$ $CONJ(i) \leftarrow T(CONJ(i), r)$

Finalizado este algoritmo, se tiene que $g_i^x = g_{CONJ(i)} \forall 1 \leq i \leq n$.

Estudiemos ahora, el segundo problema que planteábamos al comienzo. El método más directo para calcular el vector conjugación de un grupo consiste en fijar un elemento $y_1 \in G - \{1\}$ y determinar todos sus conjugados. Después, se toma un segundo elemento $y_2 \in G - (\{1\} \cup Cl_G(y_1))$ y, así sucesivamente. Este método requiere el cálculo de $(r(G)-1)|G|$ elementos conjugados. El algoritmo que presentamos a continuación solamente requiere el cálculo de $t|G|$ elementos conjugados, siendo t el número de generadores del grupo.

Supongamos que $H = \langle b_1, \dots, b_t \rangle \leq G$ y que $A = \{a_1, \dots, a_s\}$ es un subconjunto de G unión de H -clases de conjugación. Definimos el vector C cuya k -ésima componente es $C(k) = k, 1 \leq k \leq s$. El número natural $C(k)$ representa la H -clase de conjugación que contiene al elemento a_k . Inicialmente, una misma H -clase de conjugación estará representada por distintos números. Aplicamos sobre el vector C el siguiente algoritmo:

ALGORITMO 2

$i = 1, \dots, t$
$k = 1, \dots, s$
Para $a_k^{b_i} = a_l$:
$j = 1, \dots, s$
Si $C(j) = \max(C(k), C(1)), C(j) \leftarrow \min(C(k), C(1))$

Se demuestra fácilmente el siguiente resultado:

TEOREMA: Sea C el vector obtenido mediante el algoritmo anterior. Dos elementos $a_l, a_m \in A$ son H -conjugados si y sólo si $C(1) = C(m)$.

Demostración

Si $C(1) = C(m)$ es obvio que los elementos a_l, a_m son conjugados. Recíprocamente, supongamos que $\exists b = b_{i_1} \dots b_{i_r} \in H$ tal que $a_l = a_m^b$. Demostraremos por inducción sobre r que $C(1) = C(m)$.

Si $r = 1$, $a_l = a_m^{b_{i_1}}$. Efectuados los pasos $i = i_1$, $k = m$, $j = 1$ y, $i = i_1$, $k = m$, $j = m$ se tiene que $C(1) = C(m)$ y esta igualdad se mantiene hasta el final del algoritmo.

Supongamos que el resultado es válido $\forall r' < r$ y, veámoslo para $r > 1$. $b = b' b_{i_r}$ con $b' = b_{i_1} \dots b_{i_{r-1}}$. Supongamos que $a_m^{b'} = a_n$. Por hipótesis de inducción se tiene que, finalizado el algoritmo $C(m) = C(n)$. Por otro lado a partir de los pasos $i = i_s$, $k = n$, $j = 1$ y, $i = i_s$, $k = n$, $j = n$ se tiene que $C(n) = C(1)$ igualdad que también se mantiene hasta el final. Concluimos entonces que, finalizado el algoritmo, $C(m) = C(1)$, que es lo que queríamos probar.

En particular, si $A = H = G$, se tendrá que dos elementos del grupo g_i, g_j son conjugados si y sólo si $C(i) = C(j)$. De esta manera, es fácil calcular el vector conjugación Δ_G .

Observemos también que, fijado i el cálculo de los elementos $a_k^{b_i}$ para cada $a_k \in G$, puede efectuarse rápidamente utilizando el algoritmo 1.

3. EL CALCULO DEL VECTOR CONJUGACION DE UN PRODUCTO SEMIDIRECTO

En [1] A. Vera y J. Vera determinan el vector conjugación de un grupo de la forma $G = N \rtimes_{\lambda} K$ con N abeliano en términos de la estructura de los subgrupos N y K y, de la acción λ . El problema de obtener Δ_G se reduce, esencialmente, a calcular Δ_K .

Supongamos que $N = \langle n_1 \rangle \times \langle n_2 \rangle \times \dots \times \langle n_r \rangle \cong C_{l_1} \times C_{l_2} \times \dots \times C_{l_r}$ con $l_1 | l_2 | \dots | l_r$ y $K = \langle X | R \rangle$ con $X = \langle x_1, \dots, x_t \rangle$ y R un conjunto de relaciones entre los generadores de X que definen el grupo K . Enumeremos los elementos de los subgrupos N y K :

$$(h_1, n_1)(h_2, n_2) = (h_1 h_2, n_1^{h_2} n_2).$$
$$n_i^{x_j} = n_1^{e_{i1}} n_2^{e_{i2}} \dots n_r^{e_{ir}} \quad i=1, \dots, r.$$
$$M(j, u) = (j-1)|N| + u, \quad j=1, \dots, |K|; \quad u=1, \dots, |N|.$$

Podemos esquematizar este método en el siguiente algoritmo:



↓

$i = 1, \dots, t$
$j = 1, \dots, K ; u = 1, \dots, N $
Calcular $k_j^{x_i} = k_v, m_u^{x_i} = m_v$
$e = 1, \dots, K $ t.q. $C(e) = C(j); f = 1, \dots, N $
Si $M(e, f) = \max(M(j, u), M(w, v))$, entonces: $M(e, f) \leftarrow \min(M(j, u), M(w, v))$

Finalizado el algoritmo, la matriz M verifica que, dos elementos $k_i m_j, k_e m_f$ son conjugados en G si y sólo si $M(i, j) = M(e, f)$. La matriz M contiene toda la información necesaria para determinar Δ_G .

Si el subgrupo K también es abeliano, el algoritmo anterior puede simplificarse notablemente puesto que, en este caso, los elementos de K se enumeran directamente sin necesidad de utilizar el Algoritmo de Todd-Coxeter.

4. EJEMPLOS

Basándonos en los algoritmos comentados anteriormente, se han escrito varios programas en lenguaje FORTRAN que permiten obtener, en muchos casos, el vector conjugación de un grupo dado como producto semidirecto de un grupo abeliano por un grupo arbitrario. En particular, los vectores conjugación de todos los holomorfos relativos de los grupos $C_4 \times C_4$ y $C_5 \times C_5$ han sido calculados de esta manera.

A continuación damos algunos ejemplos en los que puede apreciarse la complejidad de los grupos que pueden ser tratados por estos programas. Se han adoptado los siguientes convenios:

- i) $a_1(n_1) \dots a_l(n_l)$ denotará el vector conjugación del grupo, $\Delta_G = (a_1, \dots, a_1^{n_1}, a_1, \dots, a_l, \dots, a_l^{n_l}, a_l)$.
- ii) Si $X = \langle x_1, \dots, x_l \rangle$ es un sistema de generadores del grupo, el elemento x_i se representará por el número i .

Los números $t+1, t+2, \dots$ representarán a los elementos $x_1^{-1}, x_2^{-1}, \dots$ respectivamente, salvo si $o(x_i)=2$.

- iii) Una relación $r(x_1, \dots, x_l) = x_{i_1}^{\epsilon_1} \dots x_{i_k}^{\epsilon_k} = 1$, $\epsilon_j = \pm 1$, se representará por la sucesión de números $k, \delta_1, \dots, \delta_k$, donde, k es la longitud de la relación y, δ_j denota el número que representa al elemento $x_{i_j}^{\epsilon_j}$.

Sean los grupos:

$$G_1 = A_6 = \langle x_1, x_2 | x_1^5 = x_2^5 = 1, (x_1 x_2)^2 = 1, (x_1^{-1} x_2)^4 = 1 \rangle.$$

$$G_2 = \langle x_1, x_2, x_3, x_4 \rangle_{\lambda} \langle a, b \rangle \cong C_2^4 \times_{\lambda} (C_6 \times C_2) \text{ con } \lambda \text{ dada por:}$$

$$x_1^a = x_1 x_2, x_2^a = x_1, x_3^a = x_4, x_4^a = x_1 x_3 x_4, x_1^b = x_1, x_2^b = x_2, x_3^b = x_1 x_3, x_4^b = x_1 x_2 x_4.$$

$$G_3 = \langle x_1, x_2, x_3, x_4 \rangle_{\lambda} \langle a, b, d | a^5 = b^3 = d^2 = (ba)^2 = 1, (a^2 b a^2)^d = a^2 \rangle \cong$$

$$\cong C_2^4 \times_{\lambda} \Sigma_5 \text{ con } \lambda \text{ dada por: } x_1^a = x_2, x_2^a = x_3, x_3^a = x_4, x_4^a = x_1 x_2 x_3 x_4, x_1^b = x_1 x_2,$$

$$x_2^b = x_1, x_3^b = x_2 x_3 x_4, x_4^b = x_1 x_3, x_1^d = x_1, x_2^d = x_2, x_3^d = x_2 x_3, x_4^d = x_1 x_2 x_4.$$

$$G_4 = \langle x, y \rangle_{\lambda} ((\langle a, b \rangle \times_{\mu} \langle c \rangle) \times_{\tau} \langle d \rangle) \cong C_6^2 \times_{\lambda} (SL(2, 3) \times_{\tau} C_2) \text{ con}$$

$$\langle a, b \rangle \cong Q_8, a^c = b, b^c = ab, a^d = a^{-1}, b^d = b^{-1}, c^d = cb, x^a = x^2, y^a = y^{-2}, x^b = y,$$

$$y^b = x^{-1}, x^c = x^{-2} y^{-1}, y^c = x^{-2} y, x^d = y, y^d = x.$$

$$G_5 = \text{Hol}(C_4 \times C_4) = \langle x, y \rangle_{\lambda} \langle a_1, a_2, a_3, a_4 \rangle_{\mu} \langle a, b \rangle \cong$$

$$\cong C_2^4 \times_{\lambda} (C_2 \times_{\mu} \Sigma_3) \text{ con } a_1^a = a_1, a_2^a = a_2 a_3, a_3^a = a_2, a_4^a = a_2 a_4, a_1^b = a_1, a_2^b = a_2 a_3,$$

$$a_3^b = a_3, a_4^b = a_1 a_3 a_4, x^{a_1} = x^{-1}, y^{a_1} = y^{-1}, x^{a_2} = x^{-1} y^2, y^{a_2} = y^{-1}, x^{a_3} = x^{-1},$$

$$y^{a_3} = x^2 y^{-1}, x^{a_4} = x, y^{a_4} = y^{-1}, x^a = y, y^a = x^{-1} y^{-1}, x^b = x, y^b = x^{-1} y^{-1}.$$

A continuación damos los datos de entrada/salida proporcionados por un microordenador al ejecutarse los programas mencionados anteriormente para cada uno de estos grupos.

EJEMPLO 1

ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES DEL GRUPO 2
 ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES E INVERSOS 4
 ESCRIBE LOS INVERSOS DE LOS GENERADORES 3, 4, 1, 2,
 ESCRIBE EL VECTOR DE LAS RELACIONES 5, 1, 1, 1, 1, 1, 5, 2, 2, 2, 2, 2, 4, 1, 2, 1,
 2, 8, 3, 2, 3, 2, 3, 2, 3, 2, 0,
 EL NUMERO DE CLASES DE CONJUGACION DEL GRUPO ES: 7
 EL VECTOR CONJUGACION DEL GRUPO ES:
 360 (1) 9 (2) 8 (1) 5 (2) 4 (1)

EJEMPLO 2

ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES DE N 4
 ESCRIBE EL TIPO DEL SUBGRUPO N 2, 2, 2, 2,
 ESCRIBE EL NUMERO DE GEN. DEL SUBGRUPO K 2
 ESCRIBE EL TIPO DEL SUBGRUPO K 6, 2,
 ESCRIBE LOS VALORES DE LAS MATRICES DE CONJ. 1, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0,
 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 1, 0, 1,
 EL NUMERO DE CLASES DE CONJUGACION GRUPO ES: 17
 EL VECTOR CONJUGACION DEL GRUPO ES:
 192 (1) 64 (1) 48 (3) 16 (4) 12 (8)

EJEMPLO 3

ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES DE N 4
 ESCRIBE EL TIPO DE N 2, 2, 2, 2,
 ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES DE K 3
 ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES E INVERSOS DE K 5
 ESCRIBE LOS INVERSOS DE LOS GENERADORES DE K 4, 5, 3, 1, 2,
 ESCRIBE LAS MATRICES DE CONJUGACION 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1,
 1, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1,
 1, 0, 1, 1, 0, 1,
 ESCRIBE EL VECTOR DE LAS RELACIONES DE K 5, 1, 1, 1, 1, 1, 3, 2, 2, 2, 2, 3, 3, 4, 2,
 1, 2, 1, 9, 4, 4, 3, 1, 1, 2, 1, 1, 3, 0,
 EL NUMERO DE CLASES DE CONJUGACION DEL GRUPO ES:
 12
 EL VECTOR CONJUGACION DEL GRUPO ES:
 1920 (1) 128 (1) 48 (1) 32 (2) 16 (2) 8 (2) 6 (2) 5 (1)

EJEMPLO 4

ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES DE N 2
 ESCRIBE EL TIPO DE N 5, 5,
 ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES DE K 4
 ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES E INVERSOS DE K 7
 ESCRIBE LOS INVERSOS DE LOS GENERADORES DE K 5, 6, 7, 4, 1, 2, 3,
 ESCRIBE LAS MATRICES DE CONJUGACION 2, 0, 0, 3, 0, 1, 4, 0, 3, 4, 3, 1, 0, 1, 1, 0,
 ESCRIBE EL VECTOR DE LAS RELACIONES DE K 4, 1, 1, 1, 1, 4, 6, 6, 1, 1, 4, 1, 6, 1, 2,
 3, 3, 3, 3, 4, 6, 7, 1, 3, 5, 6, 5, 7, 2, 3, 2, 4, 4, 4, 1, 4, 1, 4, 4, 2, 4,
 2, 4, 5, 6, 7, 4, 3, 4, 0,
 EL NUMERO DE CLASES DE CONJUGACION DEL GRUPO ES: 16
 EL VECTOR CONJUGACION DEL GRUPO ES:
 1200 (1) 50 (1) 48 (3) 40 (1) 12 (8) 10 (1) 8 (1)

EJEMPLO 5

ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES DE N 2
 ESCRIBE EL TIPO DE N 4, 4,
 ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES DE K 6
 ESCRIBE EL NUMERO DE GENERADORES E INVERSOS DE K 7
 ESCRIBE LOS INVERSOS DE LOS GENERADORES DE K 1, 2, 3, 4, 7, 6, 5,
 ESCRIBE LAS MATRICES DE CONJUGACION 3, 0, 0, 3, 3, 2, 0, 3, 3, 0, 2, 3, 1, 0, 0, 3, 0, 1,
 3, 3, 1, 0, 3, 3,
 ESCRIBE EL VECTOR DE LAS RELACIONES DE K 2, 1, 1, 2, 2, 2, 2, 3, 3, 2, 4, 4, 4, 1, 2, 1, 2,
 4, 1, 3, 1, 3, 4, 1, 4, 1, 4, 4, 2, 3, 2, 3, 4, 2, 4, 2, 4, 4, 3, 4, 3, 4, 3, 5, 5,
 5, 2, 6, 6, 4, 5, 6, 5, 6, 4, 1, 7, 1, 5, 5, 3, 2, 7, 2, 5, 4, 2, 7, 3, 5, 5, 4, 2, 7,
 4, 5, 4, 1, 6, 1, 6, 5, 3, 2, 6, 2, 6, 4, 3, 6, 3, 6, 6, 4, 3, 1, 6, 4, 6, 0,
 EL NUMERO DE CLASES DE CONJUGACION DEL GRUPO ES:
 33
 EL VECTOR CONJUGACION DEL GRUPO ES:
 1536 (1) 512 (1) 384 (1) 256 (2) 192 (1) 128 (7) 64 (6) 32 (4) 16 (6) 12 (4)

BIBLIOGRAFIA

- [1] A. VERA LOPEZ, J. VERA LOPEZ. "Classification of finite groups according to the number of conjugacy classes". Isr. J. Math. 51, p. 305-338, (1985).
- [2] A. VERA LOPEZ, C. LARREA. "Conjugacy classes in finite groups II". Por aparecer en Houston J. Math.
- [3] J. LEECH (y otros). "Computational Group Theory". Editado por M. D. Atkinson. Academic Press Inc. Londres, (1984).

ON TOTALLY GEODESIC INVARIANT SUBMANIFOLDS OF AN S-MANIFOLD

L.M. FERNÁNDEZ

Dpto.: Algebra, Computación, Geometría y Topología.

Facultad de Matemáticas. Universidad de Sevilla.

Apdo. de Correos 1.160. 41080 SEVILLA (España).

In [1], S-manifolds, which reduce in a special case to Sasakian manifolds, were defined. In this note, a condition for an invariant submanifold of codimension greater than 2 in an S-manifold to be totally geodesic is obtained.

0. INTRODUCTION.- D. Blair, (Blair, [1]), has defined S-manifolds which reduce, in a special case, to Sasakian manifolds. On the other hand, many authors have studied invariant submanifolds of Sasakian manifolds, (see, e.g., Kon, [5] and Kon, [6]). Kobayashi and Tsuchiya, (Kobayashi and Tsuchiya, [4]), have investigated some topics in the geometry of invariant submanifolds of S-manifolds. Specially, they have obtained a condition for an invariant submanifold of codimension 2 in an S-manifold of constant invariant f -sectional curvature to be totally geodesic.

The purpose of the present note is to study invariant submanifolds of codimension greater than 2 and with flat normal connection in S-manifolds whose invariant f -sectional curvature is constant and to obtain a condition for them to be

totally geodesic. To this end, in section 1, we give a brief summary of notations and formulas for submanifolds and, in section 2, definitions and some properties of S-manifolds. In section 3 we get the main result.

1. PRELIMINARIES.- Let N^n be a Riemannian manifold of dimension n and M^m an m -dimensional submanifold of N^n . Let g be the metric tensor field on N^n as well as the induced metric on M^m . We denote by $\tilde{\nabla}$ the covariant differentiation in N^n and by ∇ the covariant differentiation in M^m determined by the induced metric. Let $T(N)$ (resp. $T(M)$) be the Lie algebra of vector fields on N^n (resp. on M^m) and $T(M)^\perp$ the set of all vector fields normal to M^m .

The Gauss - Weingarten formulas are given by

$$(1.1) \quad \begin{aligned} \tilde{\nabla}_X Y &= \nabla_X Y + \sigma(X, Y), \\ \tilde{\nabla}_X V &= -A_V X + D_X V, \quad X, Y \in T(M), \quad V \in T(M)^\perp, \end{aligned}$$

where D is the connection in the normal bundle, σ is the second fundamental form of M^m , A_V is the Weingarten endomorphism associated with V and it satisfies:

$$g(A_V X, Y) = g(\sigma(X, Y), V).$$

We denote by \tilde{R} , R and R^D the curvature tensors associated with $\tilde{\nabla}$, ∇ and D respectively. If R^D vanishes identically the normal connection D is said to be flat. The Ricci equation is given by

$$(1.2) \quad \begin{aligned} \tilde{R}(X, Y, U, V) &= R^D(X, Y, U, V) - g([A_U, A_V]X, Y), \\ X, Y \in T(M), \quad U, V \in T(M)^\perp, \end{aligned}$$

where $[A_U, A_V]X = A_U A_V X - A_V A_U X$.

Finally, the submanifold M^m is said to be totally geodesic in N^n if its second fundamental form is identically zero.

2. S-MANIFOLDS.- Let N^{2n+s} be a $(2n+s)$ -dimensional manifold with an f -structure f of rank $2n$. If there exist on N^{2n+s} vector fields ξ_1, \dots, ξ_s , such that, if η_1, \dots, η_s are dual 1-forms, then

$$(2.1) \quad \eta_\alpha(\xi_\beta) = \delta_{\alpha\beta}; \quad f\xi_\alpha = 0; \quad \eta_\alpha \circ f = 0; \\ f^2 = -I + \sum_{\alpha} \xi_\alpha \otimes \eta_\alpha, \quad \alpha, \beta \in \{1, \dots, s\},$$

N^{2n+s} is said to have an f -structure with complemented frames. Further, the f -structure is said to be normal if

$$[f, f] + 2 \sum_{\alpha} \xi_\alpha \otimes d\eta_\alpha = 0,$$

where $[f, f]$ is the Nijenhuis torsion of f . Moreover, it is known that there exists a Riemannian metric g on N^{2n+s} satisfying, (Yano, [7]):

$$(2.2) \quad g(X, Y) = g(fX, fY) + \Phi(X, Y), \quad X, Y \in T(N),$$

where $\Phi(X, Y) = \sum_{\gamma} \eta_{\gamma}(X) \eta_{\gamma}(Y)$. The fundamental 2-form F on N^{2n+s} is defined by

$$F(X, Y) = g(X, fY), \quad X, Y \in T(N).$$

A normal f -structure with F closed is called a K -structure and N^{2n+s} is called a K -manifold. In such a manifold, the ξ_α are Killing vector fields, (Blair, [1]).

Let \mathcal{L} denote the distribution determined by $-f^2$ and \mathcal{M} the complementary distribution. \mathcal{M} is determined by $f^2 + I$ and spanned by ξ_1, \dots, ξ_s . If $X \in \mathcal{L}$, then $\eta_\alpha(X) = 0$, for any α and if

$X \in M$, then $fX = 0$.

A K-structure such that $F = d\eta_\alpha$, $\alpha = 1, \dots, s$, is called an S-structure and N^{2n+s} is called an S-manifold. These manifolds have been studied in (Blair, [1]). For the Riemannian connection $\tilde{\nabla}$ of g on an S-manifold N^{2n+s} , the following were also proved:

$$(2.3) \quad \tilde{\nabla}_X \xi_\alpha = -fX, \quad X \in T(N), \quad \alpha \in \{1, \dots, s\},$$

$$(2.4) \quad (\tilde{\nabla}_X f)Y = \sum_{\alpha} \left[g(fX, fY) \xi_\alpha + \eta_\alpha(Y) f^2 X \right], \quad X, Y \in T(N).$$

A plane section π is called an invariant f-section if it is determined by a vector $X \in \mathcal{L}(p)$, $p \in N^{2n+s}$, such that $\{X, fX\}$ is an orthonormal pair spanning the section. The sectional curvature $K(X, fX)$, denoted by $H(X)$, is called an invariant f-sectional curvature. If N^{2n+s} is an S-manifold of constant invariant f-sectional curvature k , then its curvature tensor has the form, (Kobayashi and Tsuchiya, [4])

$$(2.5) \quad \begin{aligned} \tilde{R}(X, Y, Z, W) = & \sum_{\alpha, \beta} \{ g(fX, fW) \eta_\alpha(Y) \eta_\beta(Z) - \\ & - g(fX, fZ) \eta_\alpha(Y) \eta_\beta(W) + g(fY, fZ) \eta_\alpha(X) \eta_\beta(W) - \\ & - g(fY, fW) \eta_\alpha(X) \eta_\beta(Z) \} + \\ & + ((1/4)(k+3s) \{ g(X, W) g(fY, fZ) - g(X, Z) g(fY, fW) + \\ & + g(fY, fW) \Phi(X, Z) - g(fY, fZ) \Phi(X, W) \} + \\ & + (1/4)(k-s) \{ F(X, W) F(Y, Z) - F(X, Z) F(Y, W) - \\ & - 2F(X, Y) F(Z, W) \}), \quad X, Y, Z, W \in T(N). \end{aligned}$$

In the case $s = 1$, an S-manifold is a Sasakian manifold. For $s \geq 2$, examples of S-manifolds are given in (Blair, [1]), (Blair, [2]), (Blair, Ludden and Yano, [3]). Thus, the bundle space of a principal toroidal bundle over a Kaehler manifold with certain conditions is an S-manifold. In this way, a

generalization of the Hopf fibration $\pi': S^{2n+1} \longrightarrow \mathbb{P}\mathbb{C}^n$ is introduced as a canonical example of an S-manifold playing the role of complex projective space in Kaehler geometry and the odd-dimensional sphere in Sasakian geometry.

Now, let M^m be an m-dimensional submanifold immersed in an S-manifold N^{2n+s} . For any $X \in T(M)$, we write

$$(2.6) \quad fX = TX + NX,$$

where TX is the tangential component of fX and NX is the normal component of fX . Then, T is an endomorphism of the tangent bundle and N is a normal-bundle valued 1-form on the tangent bundle. It is easy to show that if T does not vanish, it defines an f -structure in the tangent bundle. On the other hand, if one of the ξ_α is normal to M^m , then $T \equiv 0$, because

$$g(X, fY) = F(X, Y) = d\eta_\alpha(X, Y) = 0, \quad X, Y \in T(M),$$

The submanifold M^m is said to be invariant if all of ξ_α ($\alpha = 1, \dots, s$) are always tangent to M^m and N is identically zero, i.e., $fX \in T(M)$, for any $X \in T(M)$. It is easy to show that an invariant submanifold of an S-manifold is such that $fV \in T(M)^\perp$, for any $V \in T(M)^\perp$. Moreover, it is an S-manifold too and, so, $m = 2p + s$. For later use, we prove the following

Lemma 2.1.- Let M^{2p+s} be an invariant submanifold of an S-manifold N^{2n+s} . Then, for any $X \in T(M)$, $V \in T(M)^\perp$, $\alpha \in \{1, \dots, s\}$:

$$(2.7) \quad A_{fV}X = fA_VX = -A_VfX.$$

Proof: By using the Weingarten formula (1.1), (2.4) and the fact that M^{m+s} is an invariant submanifold, it is easy to show that $A_{fV}X = fA_VX$. Now, if $Y \in T(M)$, we have

$$g(A_{fV}X, Y) = g(X, A_{fV}Y) = g(X, fA_VY) = -g(A_VfX, Y)$$

and (2.7) holds.

3. INVARIANT SUBMANIFOLDS WITH FLAT NORMAL CONNECTION.- In this section, let $N^{2n+s}(k)$ be an S-manifold whose invariant f-sectional curvature is a constant k . Let M^{2p+s} be an invariant submanifold of $N^{2n+s}(k)$ such that the normal connection of M^{2p+s} is flat, i. e., $R^D \equiv 0$. Then, by using the Ricci equation (1.2) and Lemma 2.1, we have

$$\tilde{R}(X, fY, V, fV) = 2g(A_V X, A_V Y),$$

for any vector field $X, Y \in T(M)$ and any unit vector field $V \in T(M)^\perp$. Now, from (2.5) we obtain

$$(3.1) \quad (s-k)g(fX, fY) = 4g(A_V X, A_V Y).$$

Then, we get the following

Proposition 3.1.- Let M^{2p+s} be an invariant submanifold of an S-manifold $N^{2n+s}(k)$ with flat normal connection. Then, $k \leq s$ and the equality holds if and only if M^{2p+s} is totally geodesic.

Now, we prove

Theorem 3.2.- Let M^{2p+s} be an invariant submanifold of an S-manifold $N^{2n+s}(k)$. If the codimension of M^{2p+s} is greater than 2, then the normal connection of M^{2p+s} is flat if and only if $k = s$ and M^{2p+s} is totally geodesic.

Proof: From the Ricci equation (1.2) and (2.5), it is clear that if M^{2p+s} is totally geodesic, then its normal connection is flat. Now, we suppose that M^{2p+s} is not totally geodesic. We can choose a local field of orthonormal frames for vector fields in M^{2p+s} in the form

$$\{E_1, \dots, E_p, E_{p+1} = fE_1, \dots, E_{2p} = fE_p, \xi_1, \dots, \xi_s\}.$$

If $A_V(E_i) = 0$, for some unit vector field $V \in T(M)^\perp$, then, from (3.1), we get that M^{2p+s} is totally geodesic, by virtue of Proposition 3.1. Thus, $A_V(E_i) \neq 0$, for any E_i and V , and so, $A_V(E_1), \dots, A_V(E_{2p})$ are linearly independent.

On the other hand, it is easy to show, by using (3.1) again, that

$$(3.2) \quad A_V A_W + A_W A_V = 0,$$

for any orthonormal vector fields $V, W \in T(M)^\perp$. Thus, from (1.2) and (3.2), we get

$$\tilde{R}(X, Y, V, W) = 2g(A_V X, A_W Y), \quad X, Y \in T(M).$$

Using (2.5), we obtain

$$(3.3) \quad (s-k)g(X, fY)g(V, fW) = 4g(A_V X, A_W Y).$$

If the codimension of M^{2p+s} is greater than 2, we can take a unit vector field W in $T(M)^\perp$ which is orthogonal to V and fV . Regarding to (3.3), it follows that $g(A_V X, A_W Y) = 0$, for any $X, Y \in T(M)$. Consequently, the vector fields

$$A_V(E_1), \dots, A_V(E_{2p}), A_W(E_1), \dots, A_W(E_{2p})$$

are linearly independent, which is a contradiction. Therefore, M^{2p+s} is totally geodesic and $k = s$.

Finally, for codimension 2, we have the following

Theorem 3.3.- (Kobayashi and Tsuchiya, [4]) Let M^{m+s} be an invariant submanifold of codimension 2 in an S -manifold $N^{2n+s}(k)$. Then, M^{m+s} is totally geodesic if and only if M^{m+s} is of constant invariant f -sectional curvature.

REFERENCES

- [1] Blair, D.E.: 1970, J. Diff. Geom. 4, (155-167).
- [2] ————— : 1971, An. ti. Univ. „Al. I. Cuza" Ia i,
(Serie nova) XVII, Fasc. 1, (171-177).
- [3] Blair, D.E., Ludden, G.D. and Yano, K.: 1973, Trans. Am.
Math. Soc. 181, (175-184).
- [4] Kobayashi, M. and Tsuchiya, S.: 1972, Kodai Math. Sem.
Rep. 24, (430 - 450).
- [5] Kon, M.: 1973, Kodai Math. Sem. Rep. 25, (330-336).
- [6] —————: 1974, Tensor N.S. 28, (133-138).
- [7] Yano, K.: 1963, Tensor 14, (99-109).

UNIFORMLY CONTINUOUS PROPER ENDS

A. MÁRQUEZ

Departamento de Algebra, Computación, Geometría y Topología.
Facultad de Matemáticas. Universidad de Sevilla.
C/ Tarifa s/n. 41012 SEVILLA (España).

We introduce here two kind of ends which are related with the metric structure of the space, and so we can get a metric completion based on the definition given here. With this completion, each Peano's continuum is obtained as the set of end points of a metric space homeomorphic to $S^1 \times [0,1)$. The relation between both ends and the main properties of these ends and the metric completion are studied.

In this paper, all of the spaces will be metric spaces and the subspaces will be with the induced metric. J will denote the closed-open unit interval $[0,1)$ and by up-map we will understand a uniformly continuous and proper map.

1.- Up-ends

We give here two definitions of up-end which are related with the definition of ends given in [1].

1.-Definition. i) Two up-maps $f, f': J \rightarrow X$ are said to be F_{up} -related if there exists $n_0 \in \mathbb{N}$ such that for all $n \geq n_0$ there exists a path f_n from $f(1-1/n)$ to $f'(1-1/n)$ and the length of f_n tends to zero when n grows to infinity. Each class under this relation will be called a F_{up} -end of X . The set of all the F_{up} -ends of X will be denoted by $F_{Fup}(X)$.

ii) Two up-maps $f, f': J \rightarrow X$ are said to be up-related if there exists a up-map $H: M \rightarrow X$, where $M = \{(x,y)/0 \leq x < 1, 0 \leq y < 1-x\}$, such that $H|_{\{y=0\}}$ agrees with f and $H|_{\{y=1-x\}}$ agrees with f' . Each class under this relation will be called a up-end of X . The set of all the up-ends of X will be denoted by $F_{up}(X)$.

2.-Examples. Obviously, the definition given in 1 depends on to the metric of the space, for instance, the open interval $(0,1)$ has two Fup-ends and two up-ends, however the real straightline has not Fup-ends or up-ends.

3.-Proposition. There exists a map $\psi: F_{\text{Fup}}(X) \longrightarrow F_{\text{up}}(X)$.

The proof is easy from the definition. Later on we will make a study of this map, before this it is necessary to introduce the notion of up-completion:

2.- up-completion of a space.

If $F(X)$ is the set of ends of X (either Fup-ends or up-ends), it is not possible, in general, to define a metric on $X \cup F(X)$, such that X is a dense subset and preserve the natural covergences, thus at the first time it is necessary to do a quotient in $X \cup F(X)$ and so α and β ends of X are said to be related (denoted $\alpha \mathcal{R} \beta$) if there exist $f, f': J \longrightarrow X$ representatives of α and β respectively such that $\lim d(f(x), f'(x)) = 0$.

It is easy to see that $\tilde{X} = (X \cup F(X)) / \mathcal{R}$ is a subset of the completion of X , and so we can give in \tilde{X} the induced metric. \tilde{X} will be called the up-completion of X and the points of $\tilde{X} - X$ will be called end points of X .

4.-Examples. 1) The up-completion of a space can have up-ends: let X be all of the points of J except the points of the sequence $\{1-1/n\}$. Obviously, the end points of X are the points of this sequence, because it is impossible to get the point 1 of $[0,1]$ via continuous map from X , so \tilde{X} is equal to J which has a up-end.

32

2) Obviously, if the distance between X and Y is larger than zero, the up-completion of the union of X and Y is the union of the up-completion of these spaces, but this is not true in general, for instance, if X is like in 1) and Y is the set of the points of the sequence $\{1-1/n\}$ it is

easy to see that the up-completion of $X \cup Y$ is equal to $[0,1]$ and $\tilde{X} \cup \tilde{Y}$ is equal to J .

5.-Proposition. The up-completion of $X \times Y$ agrees with $\tilde{X} \times \tilde{Y}$.

6.-Proposition. a) All up-map $f: X \rightarrow Y$ extends to $\tilde{f}: \tilde{X} \rightarrow \tilde{Y}$.

b) If two metric spaces are up-homeomorphics, then their up-completion are homeomorphics.

7.-Examples. The inverse of Proposition 6 b) is not true in general, for example, let X be the set of the natural numbers and Y the points of the sequence $\{1/n\}$. Obviously, $\tilde{X} = X$, $\tilde{Y} = Y$ and X and Y are homeomorphics but not up-homeomorphics.

3.- Accessible ends.

We study here the relation between the proper and the Freudenthal ends with the up-ends and the Fup-ends.

8.-Definition. A proper end α is said to be accessible if there exists a up-map representative of α .

From this definition it is easy to see the following proposition.

9.-Proposition. a) Each metric end α of X defines a point of the completion of X ; this point will be denoted by x_α .

b) A proper end α is accessible if there exists $f: J \rightarrow X$ representatives of α such that the net (J, f) converges in \tilde{X} .

10.-Proposition. Let X be a compact connected space, given $M = \{x_1, \dots, x_n\}$ subset of X , such that for each $x_i \in M$, there exists $\{V_n^i\}$ basis of neighbourhoods of x_i , with $V_n^i - \{x_i\}$ path-connected. If $Y = X - M$, then Y has n Fup-ends.

Proof. X is T_2 and locally path-connected and thus given x_1 there exists a countable base of decreasing path-connected neighbourhoods $\{V_n\}$ of x_1 such that $V_n \cap (X-Y) = \emptyset$.

Given $f, f': J \rightarrow X$ up-maps with $\lim f(x) = \lim f'(x) = x_1$, without loss of generality, we can suppose that $f(J) \subset V_1, f'(J) \subset V_1$ and $f(x), f'(x) \in V_n$ if $1-1/n \leq x < 1$. Then for each V_n there exists a path f_n contained in V_n from $f(1-1/n)$ to $f'(1-1/n)$. Thus we can define a up-map h from M to X , where M is the following space:

$$M = \{(x, y) / x = 1 - 1/n, 0 \leq y \leq 1 - x : n \in \mathbb{N}\} \cup \{(x, y) / y = 0, 0 \leq x < 1\} \\ \cup \{(x, y) / y = 1 - x, 0 \leq x < 1\}$$

h will be a relation between f and f' .

11.-Remark. From the last Proposition we know that, when we are in good conditions, the number of Fup-ends agrees with the number of Freudenthal's ends.

It is easy to prove the following Proposition.

12.-Proposition. Let M be the interior of a closed manifold with boundary ∂M , then $\tilde{M} = M \cup \partial M$.

13.-Theorem. Let C be Peano's continuum, then there exists a metric space X homeomorphic to $S^1 \times J$ such that $\tilde{X} - X$ agrees with C .

Proof. If C is a Peano's continuum, we know that there exists a quotient map $f: S^1 \rightarrow C$ (Hahn-Mazurkiewicz's Theorem). Let M_f the cylinder of this map, if M_f is a metric space we claim X as $M_f - C$ (space homeomorphic to $S^1 \times J$) and from Proposition 12 we know that $\tilde{X} - X$ agrees with C ; but it is a metric space from Theorem 20, Chapter 5 and Theorem 12, Chapter 3 of [2].

14.-Remark. Obviously, the metric of X in last theorem depends on to the choice of f . It is easy to give examples of two maps f and g such that M_f and M_g are not up-homeomorphics (In other words, such that M_f and M_g are not homeomorphics), let C be the unit closed interval $[0, 1]$ and

$$\begin{aligned} f: S^1 &\longrightarrow [0,1], \\ (x,y) &\longrightarrow |x| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g: S^1 &\longrightarrow [0,1] \\ (x,y) &\longrightarrow (x+1)/2 \end{aligned}$$

It is easy to see that M_f is not a manifold but, on the other hand, M_g is a manifold.

4.- Relation between up-ends and Fup-ends.

15.-Definition. Let α be a up-end of X (or Fup-end of X), we call open $*$ -neighbourhood of α , to any open V of X such that for any $f: J \longrightarrow X$ representative of α , the set $f^{-1}(X-V)$ is a compact subset of J .

16.-Theorem. Let $\Psi: F_{\text{Fup}}(X) \longrightarrow F_{\text{up}}(X)$ be the map of Proposition 3. If α is a up-end of X then $\Psi^{-1}(\Psi(\alpha))$ is in an 1-1 relation with $\lim^1 \{\pi_0(V_n)\}$ where $\{V_n\}$ is a countable base of $*$ -neighbourhood of α . Thus it verifies:

a) If the inverse system satisfies Mittag-Leffler's condition then $\Psi^{-1}(\Psi(\alpha))$ is only one end.

b) In other case, $\Psi^{-1}(\Psi(\alpha))$ has the continuum power.

Proof. If α is a up-end of X , we intersect a countable base of x_α with a suitable $*$ -neighbourhood of α and we get a countable base of $*$ -neighbourhood of α , and now, the proof follows in the same way as in [3].

17.-Remark. a) The last Theorem means that the relation between Fup-ends and up-ends is the same as in Freudenthal's ends and proper ends showed in [1].

b) If Y is the complement in a compact of a set with a finite number of points, in the same conditions as Proposition 10, Y could have a number of up-ends distinct of n .

Let Y be the following set:

$$\begin{aligned} Y = \{ (x,y)/x=1-1/n, 0 \leq y \leq 1-x : n \in \mathbb{N} \} \cup \{ (x,y)/y=0, 0 \leq x < 1 \} \\ \cup \{ (x,y)/y=1-x, 0 \leq x < 1 \} \end{aligned}$$

It is easy to check, thanks to Theorem 16, that Y has as ends as power continuum.

Acknowledgements: This work was supported by CAICYT grant 0812-84.

References

- [1] E. Domínguez, L.J. Hernández. *Remarks about Proper ends*. Preprint Sem. García Galdeano nº111.
- [2] O. Hinrichsen, J.L. Fernández. *Topologia General*. URMO.1977.
- [3] J.R. Isbell. *Uniform spaces*. Amer. Math. Soc. Surveys nº 12 1964.
- [4] M.L. Mihalik. *Semi-stability at the end of a group extension*. Trans. Amer.Math.Soc. 227 307-321 (1983).
- [5] T. Porter. *Proper Homotopy, prohomotopy and coherence*. Public.Sem. García Galdeano Sec. 3. nº10. 1987.

CENTRAL SEQUENCE OF LIE ALGEBRAS

J.R. GÓMEZ

Departamento de Matemática Aplicada. Escuela Universitaria
Politécnica (Universidad de Sevilla). Virgen de Africa, 7.
41011 SEVILLA (España).

We define the central sequence of a resoluble or nilpotent Lie algebra and we study some of its properties. This concept gives a tool for the classification of such algebras. We study its relation with the nilpotent sequence of nilpotent Lie algebras and we give a characterization of filiform Lie algebras.

1. INTRODUCTION.

Nowadays, the classification of resoluble and nilpotent Lie Algebras is an open problem, although the clasification of semisimple Lie Algebras was obtained long time ago.

Dixmier classified in 1958 the nilpotent Lie Algebras of dimension ≤ 5 (Cf. [3]), and Morosov (Cf. [8]) obtained the classification of nilpotent ones of dimension ≤ 6 . Skjelbred and Sund has got (Cf. [10]) a classification procedure for dimension $n + 1$, if it is known the clasification of nilpotent Lie Algebras of dimension $\leq n$. This procedure is complex, and has been applied only to dimension 6, obtaining, in 1986, the Morosov's results.

37

The difficulties of this clasification procedure on dimension 7 are not casual; it is well known that the case of dimension 7 is particularly important and interesting in this algebras: this is the minimal dimension with a colection of elements and phenomena no present in dimension ≤ 7 , such as the existence of maximal abelian ideals of different dimensions, the existence of continues series of non isomorphic algebras and problems

relating with the concept of stratified nilpotent algebra. The importance of dimension 7 in Physic is great too, because the manifolds of nilpotent group of minimal dimension 7 appear in the theory of Kaluza-Klein and in the transition of Classical Mechanic to Quantic Mechanic.

Magnin studied in 1986 (Cf. [7]) the classification of nilpotent Lie Algebras of dimension < 7 , obtaining a plus fine classification than Morosov's one for dimension 6, determining all the nilpotent Lie Algebras of dimension ≤ 7 with a given Lie subalgebra of dimension 6 and justifying that the classification given in 1964 by Safullina (Cf. [6]) is not complete. Gose and Ancochea (Cf. [1] and [5]) gave a classification of nilpotent Lie Algebras of dimension 7, and studied, in 1987 (Cf. [4]), the classification of filiform ones of dimension 8.

López Garzón (Cf. [6]) has studied the choose of special bases, with elements that define ideals of dimension 1 (1987). These elements may be of two classes: central and normal elements. If L is a Lie Algebra, a central element is an element of the center of the algebra, and a normal element is an element $Y \in L$ such that

$$[Y, Z] = aY \quad \text{for all } Z \in L$$

where a is an element of the basical field of L . It will be supposed in these notes that the fields X or X_i are central ones and Y or Y_i are normal ones.

2. CENTRAL SEQUENCE OF LIE ALGEBRAS.

Let L be a Lie Algebra of dimension n , and let Z_1 be its center, if exists. Let $L_{(2)}$ be the quotient algebra L/Z_1 and Z_2 its center, if exists. Let $L_{(3)}$ be the quotient algebra $L_{(2)}/Z_2$ and Z_3 its center, if exists... If $L_{(1)}$ is the algebra L and $L_{(i)}$ is the quotient algebra $L_{(i-1)}/Z_{i-1}$, then Z_i will design the center of $L_{(i)}$, if exists. This sequence is not an infinite sequence, because it will happen that there is a $L_{(i)}$ without center or such that its center is $L_{(i)}$. Let $L_{(q)}$ be the last one appearing on the iteration of this process.

DEFINITION 1. Let L be a Lie Algebra, and let Z_i , $1 \leq i \leq q$, the centers that may be obtained on the above process.

The vector

$$(z_1, z_2, \dots, z_q, 0)$$

where

$$z_i = \dim Z_i \quad 1 \leq i \leq q$$

is called central sequence of the Lie algebra L .

Henceforth, z_q will denote the dimension of the last center obtained by means of the above construction, unless the center of L is 0, where the central sequence of L is 0.

The numbers z_i , $1 \leq i \leq q$, must satisfy $z_i \leq n$, $1 \leq i \leq n$. Furthermore, they satisfy

PROPOSITION 1. Let L be a Lie algebra. It is held

$$\sum_{i=1}^q z_i \neq n - 1$$

PROOF:

If the last equality is held, it exists some basis in L_q such that all its elements (except just one) are central ones. And this is impossible, because the bracket of this class and any other is null. Hence, this class is a central one, what is a contradiction, and it is held

$$\sum_{i=1}^q z_i = n$$

Q.E.D.

The central sequence of a nilpotent Lie algebra holds too the next result :

PROPOSITION 2. If L is a nilpotent Lie algebra, it is held

$$\sum_{i=1}^q z_i = n$$

and

$$z_q \geq 2$$

PROOF:

If L is nilpotent, exists $r \in N$ such that $L_r = \{0\}$. This fact stratifies L so that, there is a basis $\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ of L , such that the brackets of its elements are lineal combinations of the elements of $\{X_1, X_2, \dots, X_{c_2}\}$, $c_2 \leq n$ (that is a basis of L_1); the brackets of these c_2 elements and the elements of the basis of L are lineal combinations of the elements of $\{X_1, X_2, \dots, X_{c_3}\}$, $c_3 \leq c_2$ (that is a basis of L_2), and so on. On the r th-step, the elements of $\{X_1, X_2, \dots, X_{c_r}\}$, $c_r \leq c_i$ for $i = 1, 2, \dots, r-1$, satisfy that their brackets for the elements of $\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ are null.

Hence, the brackets $[X_i, X_j]$, $1 \leq i, j \leq n$, are null or elements of some class of any Z_i , $1 \leq i \leq q$. Hence, all the elements X_i , $1 \leq i \leq q$, are in any class belonging to some Z_i , or, what is the same

$$\sum_{i=1}^q z_i = n$$

The dimension of Z_q is z_q . If $z_q = 1$ then it exists only one basic element in Z_q . By a similar way to proposition 1, it is obtained that this element belongs to Z_{q-1} .

Q.E.D.

Really, the second part of proposition 2 says that $\dim L_1 \leq \dim L - 2$

PROPOSITION 3. It is held:

a) If

$$\sum_{i=1}^q z_i = n$$

then L is an algebra without normal fields.

b) If L has got a normal field, then

$$\sum_{i=1}^q z_i \leq n - 2$$

c) If L has got m linearly independent normal fields, then

$$\sum_{i=1}^q z_i \leq n - m - 1$$

PROOF:

a) A normal field Y of L satisfies

$$[Y, X_i] = a_i Y \quad 1 \leq i \leq n$$

where $\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ constitutes a basis of L , being some of the a_i not equal to 0. Hence, the class of Y is not a central class and there is not a central field in L because

$$\sum_{i=1}^q z_i = n$$

b) Let Y be a normal field of L . By the reasoning above,

$$\sum_{i=1}^q z_i \leq n - 1.$$

This sum is not $n - 1$ (by proposition 1). Hence

$$\sum_{i=1}^q z_i \leq n - 2$$

c) In this case, it can be chosen a basis of L such that

$$\{Y_1, Y_2, \dots, Y_m, X_1, X_2, \dots, X_{m-n}\}$$

where Y_i , $1 \leq i \leq m$, are normal fields. It is held

$$[Y_i, X_j] = a_{ij} Y_i \quad 1 \leq i \leq m, \quad 1 \leq j \leq m - n$$

being some of the a_{ij} not equal to 0, for each i , because in other case, as

$$[Y_i, Y_j] = 0$$

(because they are normal fields), all the Y_i are central and not normal fields.

Hence, at least one X_j ($1 \leq j \leq m - n$) does not belong to Z_i , $1 \leq i \leq m$, where c) holds.

Q.E.D.

PROPOSITION 4. If $(n, c_2, c_3, \dots, c_r)$ and $(z_1, z_2, \dots, z_q, 0)$ are the nilpotent and central sequences of a nilpotent Lie algebra L , it is held that $r = q$ and

$$c_k \leq n - \sum_{i=0}^{k-2} z_{q-i} = \sum_{i=1}^{q-k+1} z_i, \quad 2 \leq k \leq q$$

PROOF:

Really, a nilpotent Lie algebra is such that a basis of its may be split in disjoint subsets $\{X_1, \dots, X_{z_1}\}, \{X_{z_1+1}, \dots, X_{z_2}\}, \dots, \{X_{z_{q-1}+1}, \dots, X_n\}$, holding that

$$\{X_1, \dots, X_{z_1}\}$$

is a basis of Z_1 and the classes that content the elements of

$$\{X_{z_{i-1}+1}, \dots, X_{z_i}\} \quad 2 \leq i \leq q$$

constitute a basis of Z_i ($2 \leq i \leq q$). I.e., it is held that the brackets are:

$$\begin{aligned} [X_i, X_j] &= 0, & 1 \leq i \leq z_1, 1 \leq j \leq n \\ [X_i, X_j] &= \sum_{l=1}^{z_1} a_{ij}^l X_l, & z_1 + 1 \leq i \leq z_2, z_1 + 1 \leq j \leq n \\ &\vdots & \vdots \\ [X_i, X_j] &= \sum_{l=1}^{z_{k-1}} a_{ij}^l X_l, & z_{k-1} + 1 \leq i \leq z_k, z_{k-1} + 1 \leq j \leq n \\ &\vdots & \vdots \\ [X_i, X_j] &= \sum_{l=1}^{z_{q-1}} a_{ij}^l X_l, & z_{q-1} + 1 \leq i \leq z_q, z_{q-1} + 1 \leq j \leq n \end{aligned}$$

Hence, a generator system of L_1 is constituted with the fields

$$\{X_1, \dots, X_{z_1}, X_{z_1+1}, \dots, X_{z_{q-1}}\},$$

i.e., it is held that:

$$c_2 \leq \sum_{i=1}^{q-1} z_i = n - z_q$$

Similarly, it is held that:

$$c_3 \leq \sum_{i=1}^{q-2} z_i = n - z_q - z_{q-1}$$

and, generally,

$$c_k \leq \sum_{i=1}^{q-k+1} z_i = n - \sum_{i=0}^{k-2} z_{q-i}$$

To see that $r = q$ (and, consequently, that $2 \leq k \leq q$ in the expression above), it is sufficient to see that the brackets of the elements of

$$\{X_{z_{k-1}+1}, \dots, X_{z_k}\}$$

and the elements of

$$\{X_{z_{k-1}+1}, \dots, X_{z_k}, X_{z_k+1}, \dots, X_n\}$$

must be linear combinations of the elements of

$$\{X_1, \dots, X_{z_{k-1}}\}$$

and it is impossible they are linear combinations of the elements of

$$\{X_1, \dots, X_{z_{k-2}}\},$$

only because, if they were, the elements of

$$\{X_{z_{k-1}+1}, \dots, X_{z_k}\}$$

would belong to the previous stratum, i.e., they would generate central classes in $L_{(k-1)}$, that is contradictory with the fact that these classes constitute a basis of Z_k .

Q.E.D.

Consequently, a nilpotent Lie algebra may be stratified so that the central elements are in the first stratum; the elements such that their brackets with the rest of the elements are either null, either non null central elements, are placed in the second stratum, and, in general, we place in the i th-stratum the elements such that their brackets with the rest of the elements are either null, either elements of the $i-1$ previous strata, holding that it exists a bracket (as minimum) of each element of the i th-stratum which is linear combination of one or more elements of the $(i-1)$ th-stratum.

COROLLARY. Let L be a n -dimensional Lie algebra. L is filiform if and only if its central sequence is

$$(1, \dots, 1, 2, 0)$$

PROOF:

An n -dimensional filiform Lie algebra is a nilpotent Lie algebra with nilpotent sequence

$$(n, n-2, n-3, \dots, 3, 2, 1)$$

Let

$$(z_1, z_2, \dots, z_q, 0)$$

be its central sequence. It holds

$$c_2 \leq n - z_q$$

and hence,

$$z_q \leq n - c_2 = 2$$

As L is nilpotent, $z_q \geq 2$; therefore, $z_q = 2$. On the other hand, it holds

$$c_3 \leq n - z_q - z_{q-1}$$

and hence

$$z_{q-1} \leq n - z_q - c_3 = 1$$

Therefore, $z_{q-1} = 1$. Similarly, it holds

$$c_4 \leq n - z_q - z_{q-1} - z_{q-2}$$

and hence

$$z_{q-2} \leq n - z_q - z_{q-1} - c_4 = 1$$

Therefore $z_{q-2} = 1$.

In general, let's suppose that

$$z_{q-1} = z_{q-2} = \dots = z_{k+1} = 1$$

and, naturally, $z_q = 2$. It holds that

$$c_{q-k+2} \leq n - \sum_{i=0}^{q-k} z_{q-i}$$

and hence

$$\begin{aligned} z_k &\leq n - \sum_{i=0}^{q-k-1} z_{q-i} - c_{q-k+2} = \\ &= n - (2 - (1 + \dots + 1)) - (n - (q - k + 2)) = 1 \end{aligned}$$

and therefore $z_k = 1$.

Conversely, if the central sequence of an n -dimensional Lie algebra L is $(1, \dots, 1, 2, 0)$, it can be chosen a basis $\{X_1, \dots, X_n\}$ of L such that the center of L is generated by X_1 , the brackets of X_2 and the other fields are null or multiple of X_1 (and any must be $\neq 0$), the brackets of X_3 and the other are linear combinations of X_1 and X_2 (and some of these must be $\neq 0$ and some coefficient of X_2 must be $\neq 0$); in general, the brackets of the fields X_i , $2 \leq i \leq n-1$, are linear combinations in $\{X_1, \dots, X_{i-1}\}$, being some of these $\neq 0$ and some coefficient of $X_{i-1} \neq 0$. Finally, the brackets of X_n and the other fields are linear combinations of the fields X_1, \dots, X_{n-2} , being some of these $\neq 0$ and some coefficient of $X_{n-2} \neq 0$.

Therefore, this algebra is nilpotent (because $L_{n-1} = \{0\}$) and filiform (because the nilpotent sequence is $(n, n-2, n-3, \dots, 2, 1)$).

Q.E.D.

REFERENCES

1. ANCOCHEA-BERMEDEZ J.M., GOZE M, *Sur la classification des algèbres de Lie nilpotentes de dim 7*, C.R.A.S. Paris **302** 17 (1986).
2. CEREZO A., *Les algèbres de Lie nilpotentes réelles et complexes de dim 6*, Pub. Univ. Nice **27** (1983).
3. DIXMIER J., *Sur les représentations unitaires des groupes de Lie nilpotentes*, Bull. Soc. Math. France **85** (1957).
4. GOZE M, ANCOCHEA-BERMEDEZ J.M., *Classification des algèbres de Lie filiformes de dim 8*.
5. GOZE M, ANCOCHEA-BERMEDEZ J.M., "Classification des algèbres de Lie nilpotentes de dim 7," I.R.M.A., Strasbourg, 1985.

6. LOPEZ GARZON J.J., "Ideales conmutativos en las álgebras de Lie resolubles y nilpotentes," Tesis de Doctorado, Universidad de Sevilla, 1987.
7. MAGNIN L., *Sur les algèbres de Lie nilpotentes de $\dim \leq 7$* , Journal of Geom. and Physics (1986).
8. MOROSOV V.V., *Clasificación de las álgebras de Lie nilpotentes de dimensión 6*, (en ruso), Izvestia Vyschih Uchebnyh Zavedenii Matematika 4 (1958).
9. SAFIULLINA E.N., *Clasificación de las álgebras de Lie nilpotentes de dimensión 7*, (en ruso), Math. Mech. Phys. Izdat. Kazan, Univ. de Kazan (1964).
10. SKJELBRED T., SUND T., *On the classification of nilpotent Lie algebras*, Univ. Oslo Mathematics 8 (1977).
11. VERGNE M., "Sur la variété des lois nilpotentes," Thèse 3^e cycle, Paris, 1966.
12. VRANCEAU G., "Leçons de géométrie différentielle 4," Academia Rùmana.

OBSTRUCCIONES PROPIAS DE TIPO COMPACTO-NO COMPACTO I

J.I. EXTREMIANA, L.J. HERNÁNDEZ Y M.T. RIVAS

Departamento de Matemáticas. Facultad de Ciencias Matemáticas.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

In this paper we begin to develop an obstruction theory for the extension and classification of proper maps $f: X \rightarrow Y$ where X is a finite proper regular CW-complex and Y is a topological space with a finite number of proper ends. We obtain a proper extension theorem, similar to the Eilenberg's Theorem for continuous maps.

Clasificación A. M. S. (1.985): 55N35, 55Q70, 55S35, 55S37

Palabras y frases clave: Aplicación propia, homotopía propia, cohomología propia, grupos de homotopía propia de Steenrod, extensión propia, cociclo obstrucción propio, cocadena diferencia propia.

Agradecimientos: Los autores agradecen la ayuda económica prestada por la Universidad de Zaragoza, que junto con la Acción Integrada Hispano-Británica 51/18 (1988-89) ha hecho posible la realización de este artículo.

1.INTRODUCCION

Los problemas de la extensión y clasificación de aplicaciones continuas han sido fundamentales en el desarrollo de la Topología Algebraica. La teoría de obstrucción es un intento de encontrar una solución común para estos problemas. H. Whitney [26] sitúa el punto de partida de esta teoría en un artículo de Hopf del año 1933 [17] en el que clasifica las

aplicaciones de un complejo n -dimensional en la n -esfera. En 1937 el propio Whitney [25] demuestra el teorema de Hopf utilizando técnicas cohomológicas.

En el marco de la teoría Shape, Yu F. Lisitsa [19] desarrolla una teoría de obstrucción utilizando grupos de homología de Alexandroff-Čech y grupos fundamentales de Borsuk y obtiene teoremas de clasificación homotópica de sucesiones fundamentales.

T. Porter [22] desarrolla una teoría de obstrucción en pro-categorías utilizando una teoría de cohomología definida por él con coeficientes en un pro-grupo abeliano.

La categoría de las aplicaciones propias tiene aplicaciones en Topología Geométrica y Teoría Shape, ver [3], por lo tanto es importante analizar el problema de la extensión y clasificación de aplicaciones propias. En [12], [13], [14], el segundo autor desarrolla una teoría de obstrucción para aplicaciones propias utilizando una cohomología con coeficientes en un morfismo de pro-grupos. Estudia aplicaciones propias de un complejo de celdas localmente compacto y segundo numerable en un espacio arco-conexo con un solo final de Freudenthal [10]. Utilizando esta teoría de obstrucción, el cálculo de los conjuntos de clases de homotopía propia es a veces una tarea dura y complicada, ver [13] [14].

Utilizando una cohomología de tipo propio con coeficientes en un morfismo de grupos abelianos, los autores han desarrollado en [4], [6] y [9] una nueva teoría de obstrucción para aplicaciones propias de un CW-complejo propio regular y finito en un espacio arco-conexo con un único final propio. La ventaja de esta teoría es que permite realizar cálculos de manera sencilla.

En el presente artículo se comienza a desarrollar una teoría de obstrucción, que generaliza la anterior, para aplicaciones propias en las que el espacio de llegada puede tener más de un final propio. La categoría elegida para desarrollarla es aquella cuyos objetos son de la forma (g_0, X, A) , donde X es un CW-complejo propio regular finito, A un subcomplejo de X y g_0 una aplicación del conjunto de los finales propios de X , $F(X)$, en el conjunto de los finales propios $F(Y)$ de un espacio fijo Y . La elección de esta categoría está justificada por lo siguiente:

1.- Dada una aplicación propia $f: A \rightarrow Y$, si e_1, e_2 son dos finales propios de A tales que $F(i)(e_1) = F(i)(e_2)$, donde $F(i): F(A) \rightarrow F(X)$ es la aplicación inducida entre los respectivos conjuntos de finales por la inclusión $i: A \rightarrow X$, entonces para que exista una aplicación propia $g: X \rightarrow Y$ que extienda a f ($g|_A = f$) es necesario que $F(f)(e_1) = F(f)(e_2)$ donde $F(f): F(A) \rightarrow F(Y)$ es la aplicación inducida por f .

2.- Si $f, g: X \rightarrow Y$ son dos aplicaciones propias homotópicas propiamente, entonces las aplicaciones inducidas $F(f), F(g): F(X) \rightarrow F(Y)$ coinciden.

Para definir la nueva teoría de obstrucción se necesitan los grupos de homotopía propia de Steenrod π_q , π_q , los grupos de homotopía de Hurewicz π_q , y las teorías de (co)homología propia $J_*(*)$, $E_*(*)$, $H_*(*)$, cuya definición se recordará brevemente en el párrafo 2. En este mismo párrafo se define la cohomología $\mathcal{G}^*(g_0, X, A; \varphi)$ con coeficientes en un $[\mathbb{Z}\pi_k]$ -módulo φ , donde π_k es una categoría cuyo conjunto de objetos es $\{0, 1, \dots, k\}$ y cuyos únicos morfismos son $j \rightarrow j$ para $0 \leq j \leq k$ y $0 \rightarrow j$, $1 \leq j \leq k$. Para desarrollar esta teoría de obstrucción se sigue un método análogo al utilizado en los tratados clásicos sobre este tema (p.ej. [18], [24]) y se obtiene un teorema de extensión para aplicaciones propias análogo al Teorema de Eilenberg para aplicaciones continuas.

2. PRELIMINARES

Sean X e Y dos espacios topológicos. Una aplicación continua $f: X \rightarrow Y$ se dice propia si $f^{-1}(K)$ es compacto para cada subconjunto compacto-cerrado K de Y . Dos aplicaciones propias $f, g: X \rightarrow Y$ son homótopas propiamente si existe una homotopía de f a g que es una aplicación propia; en tal caso denotamos $f \simeq_p g$. Un subespacio A de X se dice que es propio si la aplicación inclusión de A en X es propia, en este caso diremos que (X, A) es un par propio. De modo natural se definen las aplicaciones propias entre pares propios y las homotopías propias entre pares de este tipo. Un rayo en X es una aplicación propia $\alpha: J \rightarrow X$, donde J es el intervalo semiabierto $[0, +\infty)$ de la recta real \mathbb{R} . Un espacio con rayo base es un par (X, α) donde α es un rayo en X . Una aplicación propia entre dos espacios con rayo base $f: (X, \alpha) \rightarrow (Y, \beta)$ es una aplicación propia $f: X \rightarrow Y$ que verifica $f \circ \alpha = \beta$. Del modo habitual se definen aplicaciones propias entre pares o triples con rayo base así como las correspondientes homotopías propias.

Recordamos a continuación algunos invariantes del tipo de homotopía propia que serán utilizados en el desarrollo de la teoría de obstrucción propia en los párrafos posteriores.

Sea (X, A, α) un par propio con rayo base. En [2] Z. Čerin define $\pi_n(X, \alpha)$ como el conjunto de clases de homotopía propia de aplicaciones propias del tipo

$$f: (S^n \times J, * \times J) \rightarrow (X, \alpha), \quad * \in S^n, \quad f(*, t) = \alpha(t),$$

bajo la relación de homotopía propia relativa a $* \times J$. Estos conjuntos admiten estructura de grupo si $n \geq 1$ (abeliano si $n \geq 2$). Notar que $\pi_0(X, \alpha)$ es el conjunto de clases de homotopía propia de aplicaciones propias de J en X ; diremos que es el conjunto de finales propios de X y lo denotaremos por $F(X)$. De manera análoga define $\pi_n(X, A, \alpha)$ pero considerando ahora aplicaciones propias del tipo

$$f: (D^n \times J, S^{n-1} \times J, * \times J \rightarrow (X, A, \alpha))$$

donde D^n es el n -disco unidad, (son grupos si $n \geq 2$ y abelianos si $n \geq 3$). De modo similar, el segundo autor en [11] e independientemente Brin y Thikstun en [1] definen los grupos de homotopía propia $\underline{\pi}_n(X, \alpha)$, $\underline{\pi}_n(X, A, \alpha)$ cambiando $S^n \times J$ por $S^n \times J / S^n \times 0$ y $D^n \times J$ por $D^n \times J / D^n \times 0$. Pueden encontrarse definiciones alternativas de estos grupos en [15] y en [23] y un estudio detallado utilizando cubos no compactos ($I^k \times J$, donde $I = [0, 1]$) en [23]. Una relación entre estos grupos y los de homotopía de Hurewicz π_n viene dada por la sucesión exacta:

$$\cdots \rightarrow \underline{\pi}_{n+1}(X, \alpha) \rightarrow \pi_{n+1}(X, \alpha(0)) \xrightarrow{\varphi} \underline{\pi}_n(X, \alpha) \rightarrow \underline{\pi}_n(X, \alpha) \rightarrow \cdots \quad (1).$$

Existe una sucesión similar para el caso relativo.

El homomorfismo φ puede definirse del modo siguiente:

Sea $f: (I^{n+1}, \partial I^{n+1}) \rightarrow (X, \alpha(0))$ una aplicación continua que representa un elemento ζ de $\pi_{n+1}(X, \alpha(0))$. Definimos

$$G: I^n \times I \times 0 \cup I^n \times 0 \times J \cup \partial I^n \times I \times J \rightarrow X$$

$$\begin{aligned} \text{haciendo} \quad G(x, t, 0) &= f(x, t) & \text{si } (x, t) \in I^n \times I \\ G(x, 0, s) &= \alpha(s) & \text{si } (x, t) \in I^n \times J \\ G(y, t, s) &= \alpha(s) & \text{si } (x, t) \in \partial I^n \times I \times J. \end{aligned}$$

Ahora aplicando la propiedad de extensión de homotopía propia, ver [23.I.1, 11] la aplicación propia G se extiende a una homotopía propia $F: I^n \times I \times J \rightarrow X$. Definimos $\varphi(\zeta)$ como el elemento de $\underline{\pi}_n(X, \alpha)$ representado por F_1 , donde $F_1(x, s) = F(x, 1, s)$. Este homomorfismo jugará un papel relevante en posteriores párrafos.

Es importante observar que $\underline{\pi}_1(X, \alpha)$ actúa en la sucesión exacta (1) ($\underline{\pi}_1(A, \alpha)$ en el caso relativo) ver [23.I.6.7]. Se dice que X es $(\tau)n$ -simple si la acción de $\underline{\pi}_1(X, \alpha)$ en $\underline{\pi}_n(X, \alpha)$ es trivial para cada rayo α en X . Si $\pi_1(X, x)$ actúa trivialmente en $\pi_n(X, x)$ para cada $x \in X$, se dice que X es $(\pi)n$ -simple. Conceptos similares se definen para el caso relativo.

W. Massey desarrolla en [20] la teoría de homología singular H_* utilizando cubos singulares (aplicaciones continuas $T: I^n \rightarrow X$). Inspirados en esta teoría pero utilizando cubos singulares propios (aplicaciones propias $T: I^n \rightarrow X$ o $T: I^{n-1} \times J \rightarrow X$) los autores definen en [5] las teorías de homología propia J_* , E_* que se describen brevemente a continuación:

Sea $C_n(X) = Q_n(X) / D_n(X)$ donde $Q_n(X)$ es el grupo abeliano libre generado por todos los n -cubos singulares propios de X , y $D_n(X)$ el subgrupo generado por los n -cubos degenerados (un n -cubo singular propio se dice degenerado si existe algún índice i tal que

$T(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n) = T(x_1, \dots, x_i', \dots, x_n)$ para cada $x_i, x_i' \in I$. Se define el operador borde ∂ del siguiente modo:

$$\partial T = \sum_{i=1}^n (-1)^i ((\alpha_i^0)^* T - (\alpha_i^1)^* T)$$

donde $(\alpha_i^l)^*$ es el homomorfismo inducido por la inclusión α_i^l definida por $\alpha_i^l(x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n) = (x_1, \dots, x_{i-1}, l, x_{i+1}, \dots, x_n)$ donde $l = 0, 1$ para $i = 1, \dots, n$ si el dominio de T es I^n y si es $I^{n-1} \times J$, $l = 0, 1$ para $i = 1, \dots, n-1$ y $l = 0$ para $i = n$, en tal caso $(\alpha_i^1)^* = 0$. El complejo de cadenas que se obtiene se denota por $C_*(X)$ y su n -ésimo grupo de homología por $J_n(X)$.

Sea $S_*(X)$ el complejo de cadenas de los cubos singulares en X ($S_n(X)$ es el grupo abeliano libre generado por todos los n -cubos singulares de X módulo el subgrupo generado por los n -cubos degenerados). Se define $E_n(X) = H_n(C_*(X)/S_*(X))$. Dado un par propio (X, A) y un grupo abeliano G se definen de la manera habitual los grupos de homología y cohomología con coeficientes en G .

La siguiente sucesión exacta relaciona la anteriores teorías de homología:

$$\dots \rightarrow E_{n+1}(X) \rightarrow H_n(X) \rightarrow J_n(X) \rightarrow E_n(X) \rightarrow \dots \quad (2)$$

donde $H_n(X)$ denota a $H_n(S_*(X))$. Análoga sucesión se obtiene para el caso relativo. Por último, conviene hacer notar que para espacios compactos las homologías H_* y J_* coinciden y la homología E_* es 0. Un desarrollo más detallado de estas teorías puede verse en [5] [23]

Para estos invariantes de homotopía propia también existen homomorfismos naturales de tipo Hurewicz

$$\begin{aligned} \rho_{\underline{\tau}}: \underline{\tau}_n(X, \alpha) &\rightarrow J_{n+1}(X), \\ \rho_{\underline{\pi}}: \underline{\pi}_n(X, \alpha) &\rightarrow E_{n+1}(X) \end{aligned}$$

que junto con el homomorfismo habitual

$$\rho_{\pi}: \pi_n(X, \alpha(0)) \rightarrow H_n(X),$$

relacionan de un modo conmutativo las sucesiones exactas (1) y (2). También en el caso relativo. (referimos al lector a [7] y a [23]).

Los autores han elaborado recientemente unas nuevas teorías de cohomología que generalizan las anteriores (ver [8]) y que se utilizarán en este trabajo para desarrollar una teoría de obstrucción para aplicaciones propias en las que el espacio de llegada tenga varios finales propios.

Sea F un conjunto finito fijo. Consideramos la categoría $p\text{-Top}_F$ cuyos objetos son de la forma (g, X) donde X es un espacio topológico y $g: F(X) \rightarrow F$ una aplicación del conjunto de finales propios de X en F ; un morfismo h entre dos objetos (g, X) (f, Y) es una aplicación

propia $h: X \rightarrow Y$ tal que $f \circ F(h) = g$ siendo $F(h)$ la aplicación inducida por h entre $F(X)$ y $F(Y)$. $p\text{-Top}_F(2)$ denotará la correspondiente categoría de los pares cuyos objetos, denotados brevemente por (g, X, A) , representan realmente la pareja $((g, X), (g \circ F(i), A))$ donde $F(i)$ es la aplicación inducida entre los conjuntos de finales propios por la inclusión $i: A \rightarrow X$ de un par propio (X, A) .

Si $F = \{e_1, \dots, e_k\}$, denotamos por $C*(X, g^{-1}(e_i))$ al complejo de cadenas de cubos singulares propios en X asociados a $g^{-1}(e_i)$, es decir,

$$C_n(X, g^{-1}(e_i)) = Q_n(X, g^{-1}(e_i)) / D_n(X, g^{-1}(e_i))$$

siendo $Q_n(X, g^{-1}(e_i))$ el grupo abeliano libre generado por los n -cubos singulares de la forma $T: I^n \rightarrow X$ ó $T: I^{n-1} \times J \rightarrow X$ tales que T es propia y $F(T)(\infty I^{n-1} \times J) \in g^{-1}(e_i)$ ($\infty I^{n-1} \times J$ denota el único final propio de $I^{n-1} \times J$), $D_n(X, g^{-1}(e_i))$ denota el subgrupo de $Q_n(X, g^{-1}(e_i))$ generado por los cubos degenerados. El operador borde está definido de la manera habitual. Al n -ésimo grupo de homología $H_n(C*(X, g^{-1}(e_i)))$ se le denota por $J_n(X, g^{-1}(e_i))$.

Al n -ésimo grupo de homología del complejo $C*(X, g^{-1}(e_i)) / S*(X)$ se le denota por $E_n(X, g^{-1}(e_i))$.

Para cada $i = 1, \dots, k$, se tiene una sucesión exacta larga

$$\dots \rightarrow H_n(X) \rightarrow J_n(X, g^{-1}(e_i)) \rightarrow E_n(X, g^{-1}(e_i)) \rightarrow H_{n-1}(X) \rightarrow \dots$$

Definimos ahora el complejo de cadenas $SC*(g, X)$ en la categoría Ab^{π_K} de funtores covariantes de π_K (categoría definida en la introducción) en la categoría de los grupos abelianos Ab . $SC*(g, X) = \{SC_n(g, X), \partial_n\}$ donde $SC_n(g, X)$ denota el siguiente objeto

$$S_n(X) \begin{array}{l} \xrightarrow{l_1} C_n(X, g^{-1}(e_1)) \\ \xrightarrow{\quad} C_n(X, g^{-1}(e_2)) \\ \quad \vdots \\ \xrightarrow{l_k} C_n(X, g^{-1}(e_k)) \end{array}$$

l_i denota el homomorfismo inclusión para cada i . El operador ∂_n es el inducido por los operadores borde de los distintos complejos.

Recordemos que Mitchell en [21] demuestra que la categoría Ab^{π_K} es equivalente a una categoría de módulos sobre el anillo de la categoría $\mathbb{Z}\pi_K$. Este anillo, denotado $[\mathbb{Z}\pi_K]$, es el anillo de matrices $(k+1) \times (k+1)$ con coeficientes enteros de la forma:

$$\begin{pmatrix} z_{00} & z_{01} & \dots & z_{0k} \\ 0 & z_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & z_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & z_{kk} \end{pmatrix}$$

Puede verse un estudio de esta categoría en [21] y [8].

Cuando X es un espacio compacto, el único objeto posible asociado a X es (\emptyset, X) y $SC*(\emptyset, X)$ resulta ser

$$S*(X) \begin{array}{l} \nearrow S*(X) \\ \longrightarrow S*(X) \\ \searrow S*(X) \end{array}$$

Llamaremos n -ésimo grupo de homología propia de (g, X) y lo denotaremos por $\mathfrak{G}_n(g, X)$ a $H_n(SC*(g, X))$. Notar que $\mathfrak{G}_n(g, X)$ es el $[\mathbb{Z}\pi_K]$ -módulo representado por:

$$H_n(X) \begin{array}{l} \nearrow J_n(X, g^{-1}(e_1)) \\ \longrightarrow J_n(X, g^{-1}(e_2)) \\ \searrow J_n(X, g^{-1}(e_k)) \end{array}$$

Si (f, Y) es otro objeto de $p\text{-Top}_F$ y $h \in p\text{-Top}_F((g, X), (f, Y))$, entonces, como $f \circ F(h) = g$ se induce de modo functorial un homomorfismo de módulos $\mathfrak{G}_n(h): \mathfrak{G}_n(g, X) \rightarrow \mathfrak{G}_n(f, Y)$. Así, para cada n , \mathfrak{G}_n es un funtor covariante de la categoría $p\text{-Top}_F$ en la categoría $Ab \pi_K$. Además, si $h, h': (g, X) \rightarrow (f, Y)$ son dos aplicaciones propias tales que $h \simeq_p h'$, entonces $F(h) = F(h')$ y $\mathfrak{G}_n(h) = \mathfrak{G}_n(h')$. Por lo tanto, \mathfrak{G}_* es un invariante de homotopía propia.

Si A es un subespacio propio de X , definimos los módulos de homología relativa $\mathfrak{G}_n(g, X, A)$ como $H_n(SC_*(g, X, A))$ donde $SC_n(g, X, A)$ es el $[\mathbb{Z}\pi_K]$ -módulo representado por:

$$S_n(X, A) \begin{array}{l} \nearrow C_n(X, A, g^{-1}(e_1)) \\ \longrightarrow C_n(X, A, g^{-1}(e_2)) \\ \searrow C_n(X, A, g^{-1}(e_k)) \end{array}$$

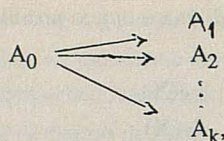
siendo $S_n(X, A) = S_n(X)/S_n(A)$ y $C_n(X, A, g^{-1}(e_i)) = C_n(X, g^{-1}(e_i))/C_n(A, (g \circ F(i))^{-1}(e_i))$.

$F(i): F(A) \rightarrow F(X)$ es la aplicación inducida por la inclusión $i: A \rightarrow X$.

Asociada al objeto $(g, X, A) \in p\text{-Top}_F(2)$, se tiene la siguiente sucesión exacta larga:

$$\cdot \rightarrow \mathfrak{G}_n(g \circ F(i), A) \rightarrow \mathfrak{G}_n(g, X) \rightarrow \mathfrak{G}_n(g, X, A) \rightarrow \mathfrak{G}_{n-1}(g \circ F(i), A) \rightarrow \cdot$$

Dado un $[\mathbb{Z}\pi_K]$ -módulo G , representado por:



de la manera habitual se definen $\mathcal{G}^n(g, X; G)$ y $\mathcal{G}^n(g, X, A; G)$. Propiedades de las (co)homologías $\mathcal{G}_*(*)$ pueden verse en [8]. Notar que si $A_i = 0$ para cada $1 \leq i \leq k$, $\mathcal{G}^n(g, X; G) = H^n(X; A_0)$ y que si $A_0 = 0$, $\mathcal{G}^n(g, X; G) = \bigoplus_1 E^n(X; A_i) \ 1 \leq i \leq k$. Igualmente en el caso relativo.

Describimos a continuación la categoría de los CW-complejos propios que generaliza la categoría de los CW-complejos y la categoría de los complejos cúbicos propios finitos [6]. Estas categorías son adecuadas para el estudio de las anteriores teorías.

Consideramos en \mathbb{R}^n la norma del máximo ($\|x\| = \max\{|x_i| \mid i = 1, \dots, n\}$, $x = (x_1, \dots, x_n)$) y usamos las siguientes notaciones:

$$E^n = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| \leq 1\},$$

$$e^n = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| < 1\},$$

$$S^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\| = 1\},$$

$$E^{n+1} = (e^n \times J) - (e^n \times \{0\}) \ (n \geq 0),$$

$$e^0 = E^0 = \{0\}.$$

Definición 2.1: Un CW-complejo propio es un espacio de Hausdorff X junto con dos conjuntos de índices A_n y B_n para cada entero $n \geq 0$ tales que $B_0 = \emptyset$, $A_n \cap B_n = \emptyset$ y aplicaciones propias

$$\Phi_{\alpha}^n : E^n \rightarrow X \text{ para cada } n \geq 0 \text{ y } \alpha \in A_n,$$

$$\Phi_{\beta}^n : E^{n-1} \times J \rightarrow X \text{ para cada } n > 0 \text{ y } \beta \in B_n,$$

que satisfacen las siguientes propiedades:

P1) $X = \bigcup_n \bigcup_{\gamma} \Phi_{\gamma}^n(c^n)$ para cada $n \geq 0$ y $\gamma \in A_n \cup B_n$, donde $c^n = e^n$ si $\gamma \in A_n$ y $c^n = E^n$ si $\gamma \in B_n$.

P2) $\Phi_{\gamma}^n(c^n) \cap \Phi_{\delta}^m(c^m) = \emptyset$ salvo si $n = m$ y $\gamma = \delta$.

P3) $\Phi_{\gamma}^n|_{c^n}$ es 1 - 1 para todo $n \geq 0$ y $\gamma \in A_n \cup B_n$.

P4) Sea $X_n = \bigcup \Phi_{\gamma}^m(c^m)$ para todo $0 \leq m \leq n$ y todo $\gamma \in A_m \cup B_m$.

Entonces,

$$\Phi_{\alpha}^n(S^{n-1}) \subset X_{n-1} \text{ para todo } n \geq 1 \text{ y } \alpha \in A_n$$

$$\Phi_{\beta}^n((E^{n-1} \times \{0\}) \cup (S^{n-2} \times J)) \subset X_{n-1} \text{ para todo } n \geq 2 \text{ y } \beta \in B_n$$

$$\Phi_{\beta}^1(E^0 \times \{0\}) \subset X_0 \text{ para todo } \beta \in B_1.$$

- P5) Un subconjunto C de X es cerrado si y solo si para cada $n \geq 0$ y cada $\gamma \in A_n \cup B_n$, $(\Phi_\gamma^n)^{-1}(C)$ es un conjunto cerrado en E^n si $\gamma \in A_n$ ó en $E^{n-1} \times J$ si $\gamma \in B_n$.
- P6) Para cada $n \geq 0$, $\Phi_\gamma^n(\Sigma^n)$ está contenido en un número finito de subconjuntos de la forma $\Phi_\delta^m(c^m)$ para cada $\gamma \in A_m \cup B_m$ donde $\Sigma^n = E^n$ si $\gamma \in A_n$ y $\Sigma^n = E^{n-1} \times J$ si $\gamma \in B_n$.

Las aplicaciones propias Φ_γ^n se llaman aplicaciones características de X , los subespacios $\Phi_\gamma^n(E^n)$ n -celdas compactas de X y los subespacios $\Phi_\gamma^n(E^{n-1} \times J)$ n -celdas no compactas de X . El subespacio X_n se llama n -esqueleto de X , y si $X_n = X$ para algún n se dice que X es de dimensión finita, el menor n para el que $X_n = X$ se llama dimensión de X . Si no existe ningún n tal que $X_n = X$, X es de dimensión infinita. Si X tiene un número finito de celdas se dice que es finito. Si cada k -celda admite una aplicación característica inyectiva y su borde $\Phi_\gamma^k(\partial \Sigma^k)$ es la unión de $(k-1)$ celdas el CW-complejo propio se dice regular.

Definición 2.2: Dado un CW-complejo X , un subespacio L de X se dice que es un subcomplejo si para cada $n \geq 0$ existen subconjuntos A_n', B_n' de A_n, B_n , respectivamente, tales que:

- $L = \cup \Phi_\gamma^n(c^n)$ para todo $n \geq 0$ y $\gamma \in A_n' \cup B_n'$
- $\Phi_\gamma^n(\Sigma^n) \subset L$ para todo $n \geq 0$ y $\gamma \in A_n' \cup B_n'$.

Denotaremos por CWPRF la categoría de los CW-complejos propios regulares y finitos y aplicaciones propias y por CWPRF(2) la categoría cuyos objetos son los pares (X, A) donde X es un CW-complejo propio regular y finito y A un subcomplejo de X . Notemos que la aplicación $i: A \rightarrow X$ es propia. Recordemos (ver [9]) que si $(X, A) \in \text{CWPRF}(2)$ entonces (X, A) tiene la propiedad absoluta de extensión de homotopía propia (PAEHP), esto es: Dada una aplicación propia $f: X \rightarrow Y$ tal que existe una aplicación propia $F: A \times I \rightarrow Y$ con $F(a, 0) = f(a)$ para todo $a \in A$, entonces existe $G: X \times I \rightarrow Y$ tal que $G(x, 0) = f(x)$ para todo $x \in X$ y $G|_{A \times I} = F$.

Sea X un CWPRF. En [9] puede verse un algoritmo de cálculo de las homologías H_* , J_* y E_* de X que describimos brevemente a continuación: El complejo de cubos singulares propios $C_*(X)$ es homotópicamente equivalente al complejo $C_*(X) = \{C_n(X), \partial_n\}$ donde $C_n(X) = J_n(X_n, X_{n-1})$ es isomorfo al grupo abeliano libre generado por las orientaciones elegidas para todas las n -celdas de X , es decir, si σ una n -celda ($n \geq 0$) y ∂ su borde, notemos que por ser X regular σ tiene también estructura de CWPRF. Se define una

orientación sobre una n -celda σ como uno de los dos posibles generadores del grupo cíclico infinito $J_n(\sigma, \dot{\sigma})$ (si σ es compacta, $J_n(\sigma, \dot{\sigma}) = H_n(\sigma, \dot{\sigma})$). Supongamos que se ha elegido una orientación o_σ para cada σ de X . Entonces se verifica que

$$J_n(X_n, X_{n-1}) = \oplus \{ J_n(\sigma, \dot{\sigma}) \mid \sigma \text{ es una } n\text{-celda de } X \}$$

y que el homomorfismo asociado al triple (X_n, X_{n-1}, X_{n-2})

$$\partial_n: J_n(X_n, X_{n-1}) \rightarrow J_{n-1}(X_{n-1}, X_{n-2})$$

satisface para cada celda σ que $\partial_n(o_\sigma) = \sum \epsilon^\sigma_\tau o_\tau$ donde τ describe todas las $(n-1)$ -caras de σ y $\epsilon^\sigma_\tau = 1$ o $\epsilon^\sigma_\tau = -1$. En el caso que $\epsilon^\sigma_\tau = 1$ diremos que τ tiene la orientación inducida por σ (o_τ es la inducida por o_σ) y si $\epsilon^\sigma_\tau = -1$, diremos que τ tiene la orientación opuesta a la inducida por σ .

El operador borde ∂ de $C^*(X)$ es el homomorfismo descrito anteriormente y está determinado, para cada n -celda σ , por las $(n-1)$ -caras de σ , las orientaciones elegidas o_σ y o_τ para σ y sus $(n-1)$ -caras τ así como por las orientaciones que σ induce en sus $(n-1)$ -caras τ .

También en [9] se prueba que el complejo $S^*(X)$ de los cubos singulares compactos de X es homotópicamente equivalente al complejo $S^*(X)$ donde $S^*(X)$ es el subcomplejo de $C^*(X)$ generado por las orientaciones de las celdas compactas. Finalmente, se prueba que $C^*(X)/S^*(X)$ es homotópicamente equivalente al complejo cociente $C^*(X)/S^*(X)$. Nótese que es isomorfo al grupo abeliano libre generado por las orientaciones de las celdas no compactas y que el operador borde es precisamente el que $C^*(X)$ induce en el complejo cociente (Dada una n -celda no compacta, solo se deben considerar sus $(n-1)$ -caras no compactas).

Sea L un conjunto finito fijo ($L = \{e_1, \dots, e_k\}$). Denotamos por $CWPRF_L$ la subcategoría de $p\text{-Top}_L$ cuyos objetos son de la forma (g, X) donde $X \in CWPRF$ y $g: F(X) \rightarrow L$. $CWPRF_L(2)$ denotará la correspondiente categoría de los pares.

Sea (g, X) un objeto de $CWPRF_L$, podemos considerar el complejo

$$\begin{array}{c} S^*(X) \begin{array}{l} \nearrow \\ \longrightarrow \\ \searrow \end{array} \begin{array}{c} C^*(X, g^{-1}(e_1)) \\ C^*(X, g^{-1}(e_2)) \\ \vdots \\ C^*(X, g^{-1}(e_k)) \end{array} \end{array}$$

que denotaremos $SC^*(g, X)$ y donde $C_n(X, g^{-1}(e_i))$ es el grupo abeliano libre generado por las orientaciones elegidas en n -celdas compactas y aquellas no compactas tales que la aplicación inducida por su aplicación característica envía el final de $E^{n-1} \times J$ en $g^{-1}(e_i)$. El operador borde se define como en los casos anteriores, al considerar las orientaciones elegidas en las celdas y

las orientaciones inducidas en el borde. Nótese que si τ es una cara no compacta de σ , entonces σ y τ determinan el mismo final propio de X .

Teniendo en cuenta que las equivalencias construidas en [9] "conservan finales" y de [16, IV-4] fácilmente se sigue (ver [8]) que los complejos $SC_*(g, X)$ y $SC^*(g, X)$ son también homotópicamente equivalentes.

En este trabajo la orientación o_s para una celda s , se denota a veces simplemente por s y a dicho generador se le denomina celda orientada.

Para un estudio más profundo de las propiedades de los CW-complejos propios referimos al lector a [23] [9].

3.- EXTENSION PROPIA DE APLICACIONES PROPIAS

Sea Y un espacio arco-conexo con un número finito de finales propios y (g_0, X, A) un objeto de la categoría $CWPRF_{F(Y)}(2)$. \tilde{X}_n denotará $X_n \cup A$ e $i: A \rightarrow X$, $i_n: \tilde{X}_n \rightarrow X$ las aplicaciones inclusión. Sea $f: (g_0 \circ F(i), A) \rightarrow (id_{F(Y)}, Y)$ un morfismo de la categoría $p\text{-Top}_{F(Y)}$ (por comodidad, siempre que no haya lugar a confusión, se denotará $f: A \rightarrow Y$).

Definición 3.1: Sea n un entero positivo, decimos que f es n -extensible propiamente en (g_0, X) si existe una aplicación propia $g: (g_0 \circ F(i), \tilde{X}_n) \rightarrow (id_{F(Y)}, Y)$ tal que $g|_A = f$.

Se llama índice de extensión propia de f al supremo de todos los $n \in \mathbb{N}$ tales que f es propiamente n -extensible.

El índice de extensión propia es un invariante del tipo de homotopía propia y no depende de la estructura de CW propio regular finito de (X, A) como prueban los siguientes teoremas:

Proposición 3.2: Si $f, h: A \rightarrow Y$ son aplicaciones propias tales que $f \simeq_p h$. Entonces f y h tienen el mismo índice de extensión propia.

Demostración: Sea $\Phi: \tilde{X}_n \rightarrow Y$ una n -extensión propia de f y $F: A \times I \rightarrow Y$ una homotopía propia entre f y h . Por PAEHP (ver párrafo 2), F se extiende a una aplicación propia $H: \tilde{X}_n \times I \rightarrow Y$ tal que $H|_{A \times I} = F$ y $H|_{\tilde{X}_n \times 0} = \Phi$. Entonces la aplicación $\Psi: \tilde{X}_n \rightarrow Y$ definida por $\Psi(x) = H(x, 1)$ para cada $x \in \tilde{X}_n$ es una n -extensión propia de h .

Proposición 3.3: Sea (g_0, X, A) un objeto de $CWPRF_{F(Y)}(2)$ y $f: A \rightarrow Y$ una aplicación propia. Entonces, el índice de extensión propia de f no depende de la estructura de CW propio regular finito del par (X, A) .

Demostración: Sea (X', A') otra estructura CW propio regular finito para el par topológico (X, A) . Por el Teorema de aproximación celular propia [9] existe una homotopía propia H entre la identidad de A y una aplicación celular $g: A' \rightarrow A$ (considerando las dos estructuras). Aplicando PAEHP, H se extiende hasta una aplicación propia $H': X' \times I \rightarrow X$ tal que H'_0 es $\text{id}: X' \rightarrow X$. De nuevo por el Teorema de aproximación celular propia, existe una aplicación propia y celular $h: X' \rightarrow X$ tal que $h \simeq_p H_1$ y $h|_{A'} = g$.

Suponiendo ahora que $f_n: X_n \rightarrow Y$ es una n -extensión propia de $f: A \rightarrow Y$, la composición $X_n' \xrightarrow{h} X_n \xrightarrow{f_n} Y$ es una n -extensión propia de $f \circ h|_{A'}$. Como $f \circ h|_{A'} \simeq_p f \circ \text{id}_{A'} \rightarrow A$, se deduce de la Proposición 3.2 que $f: A' \rightarrow Y$ es n -extensible propiamente sobre X' .

Proposición 3.4: Dado (g_0, X, A) toda aplicación propia $f: (g_0 \circ F(i), A) \rightarrow (\text{id}_F(Y), Y)$ es 1-extensible propiamente, y si $\pi_1(Y) = 0$ entonces es 2-extensible propiamente a (g_0, X) .

Demostración: Para cada $x \in A$, definimos $g(x) = f(x)$. Sea y_0 un punto cualquiera dado de Y , entonces, para cada vértice v de $X-A$ definimos $g(v) = y_0$.

Sea σ una 1-celda de X que no está en A y sea h_σ la aplicación característica de σ . Si σ es compacta y su borde está formado por las 0-celdas v_1 y v_2 , elegimos un camino β en Y que una $g(v_1)$ y $g(v_2)$ y definimos $g(x) = b \circ (h_\sigma)^{-1}(x)$ para cada $x \in \sigma$. Si σ es no-compacta y su borde es la 0-celda v_1 , consideramos un representante α de $g_0([h_\sigma])$ y β un camino que una $g(v_1)$ y $\alpha(0)$; entonces definimos $g(x) = l \circ (h_\sigma)^{-1}(x)$ para cada $x \in \sigma$, donde $l: J \rightarrow X$ es la aplicación definida por $l(t) = \beta(t)$ si $0 \leq t \leq 1$ y $l(t) = \alpha(t-1)$ si $t \geq 1$. Así $g: X_1 \rightarrow Y$ es una 1-extensión propia de f .

Supongamos ahora que $\pi_1(Y) = 0$. Sea σ una 2-celda de X que no está en A , con aplicación característica h_σ . Si σ es compacta $g \circ h_\sigma|_{\partial E^2}$ representa un elemento del grupo trivial $\pi_1(Y)$ y por tanto g se extiende a σ . Si σ es no-compacta, las aplicaciones $g \circ h_\sigma|_{E^1 \times 0 \cup 0 \times J}$ y $g \circ h_\sigma|_{1 \times J}$ representan el mismo final propio de Y , lo que unido al hecho de ser $\pi_1(Y) = 0$, permite probar fácilmente que g se extiende de manera propia a todo σ .

Si a es un final propio de Y , denotamos por $\tau_{n-1}(Y, a)$ ($n \geq 2$) el conjunto de clases de homotopía propia de aplicaciones propias del tipo $h: \partial(I^n \times J) \rightarrow Y$ tales que

$F(h)(\infty \partial(I^n \times J)) = a$, y denotamos por $\pi_n(Y)$ el conjunto de clases de homotopía de aplicaciones del tipo $h: \partial I^{n+1} \longrightarrow Y$.

En lo que resta de trabajo Y será, además de arco-conexo, (π) - n -simple y $(\underline{\tau})$ -($n-1$)-simple para un entero $n \geq 2$. Con estas condiciones, de [18] se sigue que $\pi_n(Y, y_0) \cong \pi_n(Y)$ y de [23] que $\underline{\tau}_{n-1}(Y, \alpha) \cong \underline{\tau}_{n-1}(Y, a)$ para cada $y_0 \in Y$ y cada rayo α representante del final a . En el caso $n = 2$, como Y es $(\underline{\tau})$ -1-simple y $\underline{\tau}_1(Y, a) \cong \underline{\tau}_1(Y, \alpha) / \Omega_{\underline{\tau}}^1(Y, \alpha)$ siendo $\Omega_{\underline{\tau}}^1(Y, \alpha)$ el subgrupo generado por los elementos de la forma $\xi \cdot (u \xi)^{-1}$ donde $\xi \in \underline{\tau}_1(Y, \alpha)$, $u \in \underline{\pi}_1(Y, \alpha)$ y $u \xi$ denota la acción de u en ξ , se sigue que, en estas condiciones de simplicidad, $\underline{\tau}_1(Y, a)$ es un grupo abeliano.

Sea $F(Y) = \{a_1, \dots, a_k\}$, $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ rayos en Y representantes de a_1, \dots, a_k respectivamente y tales que $\alpha_1(0) = \dots = \alpha_k(0) = *$ (la existencia de tales representantes está garantizada por ser Y arco-conexo) y sea $\varphi_n^i: \pi_n(Y, *) \rightarrow \underline{\tau}_{n-1}(Y, \alpha_i)$, $i = 1, \dots, k$, el homomorfismo definido en el párrafo 2. Entonces el objeto de $Ab \pi_k$

$$\begin{array}{ccc} \pi_n(Y, *) & \xrightarrow{\varphi_n^1} & \underline{\tau}_{n-1}(Y, \alpha_1) \\ & \searrow & \underline{\tau}_{n-1}(Y, \alpha_2) \\ & & \vdots \\ & \searrow \varphi_n^k & \underline{\tau}_{n-1}(Y, \alpha_k), \end{array}$$

lo denotamos por

$$\begin{array}{ccc} \pi_n(Y) & \xrightarrow{\quad} & \underline{\tau}_{n-1}(Y, a_1) \\ & \searrow & \underline{\tau}_{n-1}(Y, a_2) \\ & & \vdots \\ & \searrow & \underline{\tau}_{n-1}(Y, a_k), \end{array}$$

y lo llamamos $\varphi_n(Y)$, pues es independiente de la elección de los rayos base.

Dado $(g_0, X, A) \in \text{CWPRF}_{F(Y)}(2)$, asociada con una aplicación propia $f: X_n \rightarrow Y$, $n \geq 2$, tal que $F(f) = g_0 \circ F(i_n)$ vamos a definir una cocadena obstrucción propia que denotaremos $\text{sc}^{n+1}(f) \in \text{SC}^{n+1}(g_0, X, A; \varphi_n(Y)) = \text{Hom}(\text{SC}_{n+1}(g_0, X, A); \varphi_n(Y))$, donde $\text{SC}_{n+1}(g_0, X, A)$ es el $[\mathbb{Z}\pi_k]$ -módulo representado por:

$$\begin{array}{ccc} S_{n+1}(X, A) & \xrightarrow{\quad} & C_{n+1}(X, A, g_0^{-1}(a_1)) \\ & \searrow & C_{n+1}(X, A, g_0^{-1}(a_2)) \\ & & \vdots \\ & \searrow & C_{n+1}(X, A, g_0^{-1}(a_k)), \end{array}$$

siendo $S_{n+1}(X, A)$ el grupo abeliano libre generado por las $(n+1)$ -celdas compactas orientadas de X que no están en A , y $C_{n+1}(X, A, g_0^{-1}(a_q))$, $q = 1, \dots, k$, el grupo abeliano libre generado por las $(n+1)$ -celdas compactas orientadas de X que no están en A y por las $(n+1)$ -celdas no compactas orientadas de X que no están en A y tales que su aplicación característica h_σ verifica que $F(h_\sigma)(\infty E^n \times J) \in g_0^{-1}(a_q)$. $sc^{n+1}(f)$ viene dado por los homomorfismos

$$\begin{aligned} s^{n+1}(f) : S_{n+1}(X, A) &\longrightarrow \pi_n(Y) \\ c_q^{n+1}(f) : C_{n+1}(X, A, g_0^{-1}(a_q)) &\longrightarrow \underline{\pi}_{n-1}(Y, a_q), \quad q = 1, \dots, k, \end{aligned}$$

que están definidos del modo siguiente:

1) Dada una $(n+1)$ -celda compacta σ de $X-A$ se define

$$s^{n+1}(f)(\sigma) = \pi_n(f|_{\dot{\sigma}} \circ \partial \circ \rho_\pi^{-1}(\sigma))$$

donde $\dot{\sigma}$ denota el borde de la celda σ , $\rho_\pi : \pi_{n+1}(\sigma, \dot{\sigma}, *) \longrightarrow H_{n+1}(\sigma, \dot{\sigma})$ es el isomorfismo de Hurewicz, ∂ es el operador borde de la (π) sucesión asociada al par $(\sigma, \dot{\sigma})$ y $\pi_n(f|_{\dot{\sigma}}, \cdot)$ es el homomorfismo inducido por $f|_{\dot{\sigma}}$ en los grupos de homotopía.

2) Para definir $c_q^{n+1}(f)$, distinguimos dos casos:

a) Si σ es una $(n+1)$ -celda compacta de $X-A$, entonces definimos

$$c_q^{n+1}(f)(\sigma) = \varphi_n^q(s^{n+1}(f)(\sigma))$$

b) Si σ es una $(n+1)$ -celda no compacta de $X-A$ tal que $F(h_\sigma)(\infty E^n \times J) \in g_0^{-1}(a_q)$,

definimos

$$c_q^{n+1}(f)(\sigma) = \underline{\pi}_{n-1}(f|_{\dot{\sigma}} \circ \partial \circ \rho_\tau^{-1}(\sigma))$$

donde $\rho_\tau : \underline{\pi}_n(\sigma, \dot{\sigma}, \alpha) \rightarrow J_{n+1}(\sigma, \dot{\sigma})$ es el isomorfismo de tipo Hurewicz definido en [7] (α es un rayo cualquiera en $\dot{\sigma}$), $\partial : \underline{\pi}_n(\sigma, \dot{\sigma}, \alpha) \rightarrow \underline{\pi}_{n-1}(\dot{\sigma}, \alpha)$ es el operador borde de la (τ) sucesión exacta asociada al par $(\sigma, \dot{\sigma})$ y $\underline{\pi}_{n-1}(f|_{\dot{\sigma}}) : \underline{\pi}_{n-1}(\dot{\sigma}, \alpha) \rightarrow \underline{\pi}_{n-1}(Y, f \circ \alpha) \cong \underline{\pi}_{n-1}(Y, a_q)$ es el homomorfismo inducido por f .

Definition 3.5: A la cocadena $sc^{n+1}(f)$ la llamaremos $(n+1)$ cocadena obstrucción propia de f .

Dada una $(n+1)$ -celda σ de $X-A$, si σ es compacta, la aplicación $f : \dot{\sigma} \longrightarrow Y$ representa un elemento de $\pi_n(Y)$, si σ es no compacta y $F(h_\sigma)(\infty E^n \times J) \in g_0^{-1}(a_q)$, la aplicación $f : \dot{\sigma} \rightarrow Y$ representa un elemento de $\underline{\pi}_{n-1}(Y, a_q)$. En ambos casos, si el elemento representado es cero, f tiene una extensión propia sobre σ . Debido a esto y a que X_{n+1} tiene solo un número finito de $(n+1)$ -celdas se obtiene:

Teorema 3.6: Si $f : X_n \rightarrow Y$ es una aplicación propia, entonces f tiene una extensión propia sobre X_{n+1} si y solo si $sc^{n+1}(f) = 0$.

Teorema 3.7: La cocadena $sc^{n+1}(f)$ es un cociclo.

Demostración: Si σ es una $(n+2)$ -celda compacta de $X-A$, se comprueba que $s^{n+1}(f)(\partial\sigma) = 0$ de manera análoga a la realizada en [18,4.VI-3.1]. Por otra parte, para cada $q = 1, \dots, k$, $c_q^{n+1}(f)(\partial\sigma) = \varphi_q^n(s^{n+1}(f)(\partial\sigma)) = \varphi_q^n(0) = 0$.

Si σ es una $(n+2)$ -celda no compacta de $X-A$ tal que $F(h_\sigma)(\infty_{E^{n+1} \times J}) \in g_0^{-1}(a_q)$, consideramos σ como un CWPRF $(n+2)$ -dimensional, $\dot{\sigma}$ denotará el $(n+1)$ -esqueleto de σ y $\dot{\sigma}'$ el (n) -esqueleto. Tenemos entonces el siguiente diagrama conmutativo, donde α es un rayo en $\dot{\sigma}$

$$\begin{array}{ccccc} J_{n+2}(\sigma, \dot{\sigma}) & \xleftarrow{\rho_\tau} & \tau_{n+1}(\sigma, \dot{\sigma}, \alpha) & & \\ \downarrow \partial_1 & & \downarrow \partial_2 & & \\ J_{n+1}(\dot{\sigma}) & \xleftarrow{\rho_\tau} & \tau_n(\dot{\sigma}, \alpha) & & \\ \downarrow j_1 & & \downarrow j_2 & \searrow 0 & \\ \text{H: } J_{n+1}(\dot{\sigma}, \dot{\sigma}') & \xleftarrow{\rho_\tau} & \tau_n(\dot{\sigma}, \dot{\sigma}', \alpha) & \xrightarrow{\partial} & \tau_{n-1}(\dot{\sigma}', \alpha) \xrightarrow{\tau_{n-1}(f|_{\dot{\sigma}'})} \tau_{n-1}(Y, a_q) \end{array}$$

donde ∂_1 y ∂_2 son los correspondientes operadores borde de las sucesiones de homología y homotopía propias asociadas al par $(\sigma, \dot{\sigma})$, ∂ el operador borde de la sucesión exacta de homotopía propia asociada a $(\dot{\sigma}, \dot{\sigma}')$ y j_1 y j_2 vienen inducidas por inclusiones

En virtud de que $\tau_i(\dot{\sigma}, \dot{\sigma}') = 0$ para cada $i \leq n-1$ y $\pi_0(\dot{\sigma}) = \pi_0(\dot{\sigma}') = \tau_0(\dot{\sigma}) = \tau_0(\dot{\sigma}') = 0$, aplicando el teorema de tipo Hurewicz [7] se tiene un epimorfismo $\rho_\tau: \tau_n(\dot{\sigma}, \dot{\sigma}', \alpha) \rightarrow J_{n+1}(\dot{\sigma}, \dot{\sigma}')$ y es fácil verificar que $H = \tau_{n-1}(f|_{\dot{\sigma}'}) \circ \partial \circ \rho_\tau^{-1}: J_{n+1}(\sigma, \sigma) \rightarrow \tau_{n-1}(Y, a_q)$ está bien definido y además $H(\eta) = c_q^{n+1}(f)(\eta)$ para cada $(n+1)$ -celda η de σ . Ahora es inmediato comprobar que $c_q^{n+1}(f)(\partial\sigma) = 0$.

Proposición 3.8: Si $f', f: X_n \rightarrow Y$ son dos aplicaciones propias tales que $f \simeq pf'$, entonces $sc^{n+1}(f) = sc^{n+1}(f')$.

Iniciamos ahora el estudio del problema de la extensión propia de homotopías propias, introduciendo el concepto de cocadena diferencia propia y obtenemos un primer resultado sobre la extensión propia de una aplicación propia.

Dado (g_0, X, A) , como $F(I \times X) \cong F(X)$, podemos considerar $(g_0, I \times X, I \times A)$ y denotamos $(\overline{I \times X})_n = 0 \times X_n \cup I \times X_{n-1} \cup 1 \times X_1$.

Dadas dos aplicaciones propias $f, f': X_n \longrightarrow Y$ tales que existe una homotopía propia G entre $f|_{X_{n-1}}$ y $f'|_{X_{n-1}}$, definimos $F = (f, G, f'): (\overline{I \times X})_n \longrightarrow Y$ por

$$F|_{0 \times X_n} = f; F|_{I \times X_{n-1}} = G; F|_{1 \times X_n} = f'.$$

Asociado a F tenemos el cociclo

$$sc^{n+1}(F) \in SC^{n+1}(g_0, I \times X, I \times A; \varphi_n(Y)).$$

Por otra parte, podemos definir

$$k_n: SC_n(g_0, X, A) \longrightarrow SC_{n+1}(g_0, I \times X, I \times A) \text{ por } k_n(\sigma) = I \times \sigma.$$

Notar que si σ es compacta, $k_n(\sigma)$ también es compacta, y si σ es no compacta tal que $F(h_\sigma)(\infty_{E^{n-1} \times J}) \in g_0^{-1}(a_q)$ entonces $k_n(\sigma)$ es no compacta y $F(h_{I \times \sigma})(\infty_{E^n \times J}) \in g_0^{-1}(a_q)$. En general la aplicación $k: SC^*(g_0, X, A) \longrightarrow SC^*(g_0, I \times X, I \times A)$ no conmuta con los operadores borde.

Definición 3.9: Con las notaciones anteriores, denotamos

$$\Delta^n(F) = \Delta^n(f, G, f') = sc^{n+1}(F) \circ k$$

y diremos que $\Delta^n(F)$ es la cocadena diferencia propia asociada con $F = (f, G, f')$. Si $f|_{X_{n-1}} = f'|_{X_{n-1}}$ y G es la homotopía "constante" denotaremos también $\Delta^n(F)$ por $\Delta^n(f, f')$.

Como en la teoría de obstrucción "standard" se obtiene:

Proposición 3.10: $\delta \Delta^n(F) = sc^{n+1}(f') - sc^{n+1}(f).$

Proposición 3.11: Sea $H: 0 \times X_n \cup I \times X_{n-1} \longrightarrow Y$ una aplicación propia y sea $c \in SC^{n+1}(g_0, X, A; \varphi_n(Y))$. Entonces existe una extensión propia F de H sobre $(\overline{I \times X})_n$ tal que $\Delta^n(F) = c$.

Demostración: Si σ es no compacta tal que $F(h_\sigma)(\infty_{E^{n-1} \times J}) \in g_0^{-1}(a_q)$, consideramos la aplicación propia $H|_{0 \times \sigma \cup I \times \partial \sigma} = H^\sigma$. Ahora bien, el elemento $c(\sigma) \in \pi_{n-1}(Y, a_q)$ estará representado por una aplicación propia $g: \partial(I \times \sigma) \longrightarrow Y$. Como $0 \times \sigma \cup I \times \partial \sigma$ tiene el mismo tipo de homotopía propia que J y $F(H^\sigma)(\infty_\sigma) = a_q$ (∞_σ denota el único final propio de σ) deducimos que $g|_{0 \times \sigma \cup I \times \partial \sigma}$ es homótopa propiamente a H^σ . Aplicando PAEHP se obtiene que H^σ tiene una extensión propia $F^\sigma: \partial(I \times \sigma) \longrightarrow Y$ tal que F^σ representa al elemento $c(\sigma)$.

Si σ es compacta, con las mismas notaciones H^σ tiene una extensión F^σ a $\partial(I \times \sigma)$ que representa a $c(\sigma) \in \pi_n(Y)$ como puede verse en [18.VI.4.3].

Por último, definiendo F por medio de las F^σ , como $I \times X$ es un CW-complejo finito, F es una extensión propia de H tal que $\Delta^n(F) = c$.

Como consecuencia se obtiene el siguiente teorema, análogo al Teorema de Eilenberg para obstrucción "standard":

Teorema 3.12: Sea $f: X_n \longrightarrow Y$ una aplicación propia. Entonces $f|_{X_{n-1}}$ tiene una extensión sobre X_{n+1} si y solo si $sc^{n+1}(f)$ es cohomólogo a cero.

BIBLIOGRAFIA

- [1] **Brin M. and Thickstun T.L.** "On the proper Steenrod homotopy groups and proper embeddings of planes into 3-manifolds" Trans. A.M.S., 289 (1985) 737-755.
- [2] **Čerin Z.** "On various relative proper homotopy groups" Tsukuba J. Math. Vol 4 nº 2 177-202 (1980).
- [3] **Edwards D. and Hasting H.** "Čech and Steenrod homotopy theories with applications to Geometric Topology" L. N. M. 547, Springer (1976)
- [4] **Extremiana, J.I.** "Una teoría de obstrucción para la extensión y clasificación de aplicaciones propias". Pub. Sem. Mat. García de Galdeano. Sección 2, nº 18. (Tesis)
- [5] **Extremiana J.I., Hernandez L.J. and Rivas M. T.** "Una Cohomología propia" Actas X Jornada Hispano-Lusas de Matemáticas, sección Geometría y Topología 43 - 55. Murcia. 1985.
- [6] **Extremiana, J.I., Hernández, L.J., Rivas, M.T.:** "About the classification of proper maps in the category of the finite cubic complexes". Pub. Sem. Mat. García de Galdeano. Sección 1 nº 137. (1987).
- [7] **Extremiana, J.I., Hernández, L.J., Rivas, M.T.:** "An isomorphism theorem of the Hurewicz type in the proper homotopy category". Pub. Sem. Mat. García de Galdeano. Serie II, Sección 1 nº 115. (1987). Aparecerá en Fundamenta Mathematicae 1988.
- [8] **Extremiana, J.I., Hernández, L.J., Rivas, M.T.:** "Una (co)homología propia para espacios con varios finales". Pub. Sem. Mat. García de Galdeano. Serie II, Sección 1 nº 4. (1988). Actas del III Seminario de Topología. Jaca 1987

- [9] **Extremiana, J.I., Hernández, L.J., Rivas, M.T.:** "Proper CW-Complex: a category for the study of proper homotopy". Pub.Sem.Mat. García de Galdeano. Serie II, Sección 1 nº 5. (1988).
- [10] **Freudenthal H.** "Über die Enden topologischer Räume und Gruppen" Math. Z. 33. 692-713 (1931)
- [11] **Hernández L.J.** "A note on proper invariants" Publ. Sem. Mat. García de Galdeano. Serie II, sección 1 nº 12 (1984)
- [12] **Hernández L.J.** "About the extension problem for proper maps" Top. and its applications 25 51-64 (1987)
- [13] **Hernández L.J.** "Proper cohomologies and the proper classification problem" L.N.M. 1298, 171-192, (1987).
- [14] **Hernández L.J.** "Clases de homotopía propia de una superficie no compacta en el plano euclideo" Actas II Seminario de Topología, U. Zaragoza 1986, 78-92
- [15] **Hernández L.J. and Porter T.** "Proper pointed maps from \mathbb{R}^{n+1} to a σ -compact space". Math. Proc. Camb. Philos. Soc., 1988, 103, 457-462.
- [16] **Hilton, P.J., Stammbach, U.:** "A course in homological Algebra". G.T.M. 4. Springer-Verlag 1971.
- [17] **Hopf, H.,** "Die Klassen der Abbildungen der n-dimensionalen Polyeder auf die n-dimensionalen Sphäre" Commentarii Mathematicae Helvetici, vol 5, 39-54 (1933)
- [18] **Hu S.T.** "Homotopy theory" Academic Press. (1959)
- [19] **Lisitsa Yu T.** "A Hopf classification theorem in shape theory" Siberian Math. J. 18, 107-119 (1977)
- [20] **Massey W.** "Singular Homology theory" G.T.M. 70. Springer - Verlag 1980.
- [21] **Mitchell, B.:** "Rings with several objects". Advances in Mathematics 8.1-161. 1972.
- [22] **Porter, T.:** "Coherent prohomotopy theory". Cahier Top. Geom. Diff. 19, 3-46, (1978).
- [23] **Rivas, M.T.:** "Sobre invariantes de homotopía propia y sus relaciones". Pub. Sem. Mat. García de Galdeano. Sección 2 nº 17. (1987). (Tesis).
- [24] **Whitehead, G. W.** "Elements of homotopy theory" G. T. M. 61 Springer (1978).
- [25] **Whitney, H.** "The maps of an n-complex into an n-sphere". Duke Math. J. 3, 51-55 (1937).
- [26] **Whitney, H.** "An extension theorem for mappings into simply connected spaces". Ann. of Math. 2, 285-296 (1949).

OBSTRUCCIONES PROPIAS DE TIPO COMPACTO-NO COMPACTO II

J.I. EXTREMIANA, L.J. HERNÁNDEZ Y M.T. RIVAS

Departamento de Matemáticas. Facultad de Ciencias Matemáticas.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

In this paper we obtain some classification theorems for proper homotopy classes expressed in terms of proper cohomology groups for proper maps $f: X \rightarrow Y$ where X is a finite proper regular CW-complex and Y is a topological space with a finite number of proper ends.

Clasificación A. M. S. (1.985): 55N35, 55Q70, 55S35, 55S37

Palabras y frases clave: Aplicación propia, homotopía propia, cohomología propia, grupos de homotopía propia de Steenrod, extensión propia, cociclo obstrucción propio, cocadena diferencia propia.

Agradecimientos: Los autores agradecen la ayuda económica prestada por la Universidad de Zaragoza, que junto con la Acción Integrada Hispano-Británica 51/18 (1988-89) ha hecho posible la realización de este artículo.

INTRODUCCION

En este trabajo continuamos el iniciado en "Obstrucciones propias de tipo compacto-no compacto I" (ver [4]) y nos dedicamos fundamentalmente a estudiar el problema de la clasificación de clases de homotopía propia de aplicaciones propias. Obtenemos teoremas para tal clasificación en términos de grupos de cohomología propia. Seguimos la misma notación, terminología y numeración que en el trabajo ya reseñado.

4.- EXTENSION PROPIA DE HOMOTOPIAS PROPIAS Y TEOREMAS DE CLASIFICACION

Sea $(g_0, X, A) \in \text{CWPRF}_{F(Y)}(2)$, donde Y es un espacio arco-conexo con un número finito de finales propios $(\pi)n$ -simple y $(\tau)(n-1)$ -simple. Dadas dos aplicaciones propias $f, h: (g_0, X) \longrightarrow (\text{id}_{F(Y)}, Y)$ tales que $f|_A = h|_A$, el problema que nos planteamos es decidir si f y h son o no homótopas propiamente rel. A .

Definición 4.1: Diremos que f es m -homótopa a h (rel. A) si $f|_{X_m} \simeq_p h|_{X_m}$ (rel. A).

Notar que, como Y es arco-conexo, f y h siempre son 0-homótopas propiamente. Además si $\pi_1(Y) = 0$ es fácil ver que son 1-homótopas propiamente. El supremo de los $m \in \mathbb{N}$ tales que f y h son m -homótopas propiamente se llamará índice de homotopía propia del par (f, h) . Si $f \simeq_p f'$ y $h \simeq_p h'$, es fácil ver que los pares (f, h) y (f', h') tienen el mismo índice de homotopía propia.

Supongamos que f y h son $(n-1)$ -homótopas propiamente ($n \geq 2$) (rel. A) a través de una homotopía G . Asociada a las aplicaciones f , G y h tenemos $F = (f, G, h): (\overline{I \times X})_n \rightarrow Y$ y la cocadena diferencia propia $\Delta^n(F)$ definidas en el párrafo anterior. Como ahora f y h están definidas en X , sus cociclos $sc^{n+1}(f)$ y $sc^{n+1}(h)$ son 0 y por lo tanto, de la Proposición 3.10, se sigue que $\Delta^n(F)$ es un cociclo que representa una clase de cohomología de $\mathcal{G}^n(g_0, X, A; \varphi_n(Y))$. De la Definición 3.9 y de los Teoremas 3.6 y 3.12 se deduce:

Teorema 4.2: $\Delta^n(F) = 0$ si y solo si existe una homotopía propia entre $f|_{X_n}$ y $h|_{X_n}$ que es una extensión de G .

Teorema 4.3: $\Delta^n(F)$ es cohomólogo a 0 si y solo si existe una homotopía propia G' entre $f|_{X_n}$ y $h|_{X_n}$ que coincide con G en X_{n-2} .

Introducimos a continuación alguna terminología con el propósito de abordar el problema de la clasificación de aplicaciones propias:

Sea $f: (g_0, X) \rightarrow (\text{id}_{F(Y)}, Y)$ una aplicación propia. Sea $\Omega^n(X, A; f)$ el conjunto de aplicaciones propias $H: I \times X_{n+1} \rightarrow Y$ tales que $H(0, x) = H(1, x) = f(x)$ si $x \in X_{n-1}$ y $H(t, a) = f(a)$ si $t \in I$, $a \in A$. Consideramos en $\Omega^n(X, A; f)$ la relación de homotopía propia

relativa a $\partial I \times X_{n-1} \cup I \times A$ y denotamos el conjunto cociente por $R^n(X, A; f)$. La composición standard de homotopías dota a $R^n(X, A; f)$ de una estructura de grupo.

Definimos ahora la aplicación

$$\zeta_n(f): R^n(X, A; f) \longrightarrow \mathcal{G}^n(g_0, X, A; \varphi_n(Y))$$

del modo siguiente: el elemento de $R^n(X, A; f)$ representado por la aplicación propia H es transformado por $\zeta_n(f)$ en la clase de cohomología representada por $\Delta^n(f, H, f)$.

Proposición 4.4: $\zeta_n(f)$ es un homomorfismo.

Demostración: Se deduce del siguiente Lema:

Lema 4.5: Sean $F, F'': (\overline{I \times X})_n \longrightarrow Y$ dos homotopías propias relativas a A tales que $F'(1, x) = F''(0, x)$ para cada $x \in X_n$. Entonces, la aplicación propia $F: (\overline{I \times X})_n \longrightarrow Y$ dada por:

$$F(x, t) = \begin{cases} F'(2t, x) & \text{si } 0 \leq t \leq 1/2 \\ F''(2t-1, x) & \text{si } 1/2 \leq t \leq 1 \end{cases}$$

verifica que $\Delta^n(F) = \Delta^n(F') + \Delta^n(F'')$.

Demostración: Es análoga a la del Lema 5.5 de [3], sustituyendo para una n -celda no compacta σ tal que $F(h_\sigma)(\infty_{E^{n-1} \times J}) \in g_0^{-1}(a_q)$ el grupo $\underline{\pi}_{n-1}(Y)$ por $\underline{\pi}_{n-1}(Y, a_q)$.

Con una demostración análoga a la de homotopía standard, del Lema 4.5, se deduce que el subgrupo $\zeta_n(f)(R^n(X, A; f))$ únicamente depende de la $(n-1)$ -clase de homotopía propia de f relativa a A .

Como en la homotopía standard, definimos a continuación los conjuntos obstrucción.

Definición 4.6: Dadas dos aplicaciones propias $f, h: (g_0, X) \longrightarrow (id_{F(Y)}, Y)$ que coinciden en A , denotamos por $\theta^n(f, h)$ el conjunto cuyos elementos son las clases de cohomología propia representadas por $\Delta^n(f, G, h)$ donde G es una $(n-1)$ -homotopía propia (rel. A) entre f y h . Si f y h no son $(n-1)$ -homótopas propiamente, $\theta^n(f, h) = \emptyset$.

Del modo habitual, dada $f: A \longrightarrow Y$ propia, se define $\theta^{n+1}(f)$ como el conjunto de clases de cohomología propia representadas por $sc^{n+1}(f_n)$ donde f_n es una n -extensión propia de f a (g_0, X) . Si f no es n -extensible propiamente, $\theta^{n+1}(f) = \emptyset$.

Proposición 4.7: Dos aplicaciones propias $f, h: (g_0, X) \longrightarrow (id_{F(Y)}, Y)$ que coinciden en A son $(n-1)$ -homótopas propiamente rel. A si y solo si $\theta^n(f, h)$ es una coclase de

$\zeta_n(f)(R^n(X,A;f))$ en $\mathcal{G}^n(g_0,X,A;\varphi_n(Y))$. Además, f y h son n -homótopas propiamente rel. A si y solo si $\theta^n(f,h) = \zeta_n(f)(R^n(X,A;f))$.

De la Proposición anterior se deduce que dos aplicaciones propias $f,h: (g_0,X) \longrightarrow (id_{F(Y)},Y)$ $(n-1)$ -homótopas propiamente rel. A determinan un único elemento en $\text{Coker } \zeta_n(f)$ al que denotamos $\chi^n(f,h)$ y llamamos elemento característico del par (f,h) . Es claro que f y h son n -homótopas propiamente rel. A si y solo si $\chi^n(f,h) = 0$. Como consecuencia, se obtienen los siguientes resultados:

Teorema 4.8: Sea $f: (g_0,X) \longrightarrow (id_{F(Y)},Y)$ una aplicación propia. Sea Y $(\pi)r$ -simple y $(\tau)(r-1)$ -simple y $\text{Coker } \zeta_r(f) = 0$ para cada entero r tal que $n < r \leq m$. Si una aplicación propia $h: (g_0,X) \longrightarrow (id_{F(Y)},Y)$ es n -homótopa propiamente a f rel. A , entonces f y h son m -homótopas propiamente rel. A .

Corolario 4.9: Si $\pi_1(Y) = 0$, Y es $(\tau)(r-1)$ -simple, y $\mathcal{G}^r(g_0,X,A;\varphi_r(Y)) = 0$ para cada entero r tal que $1 < r \leq \dim(X-A)$, entonces dos aplicaciones propias $f,h: (g_0,X) \longrightarrow (id_{F(Y)},Y)$ que coinciden en A son homótopas propiamente relativas a A .

Demostración: Como $\pi_1(Y) = 0$, f,h son 1-homótopas propiamente; que son homótopas propiamente es una consecuencia del Teorema 4.8

Dada $f: (g_0,X) \longrightarrow (id_{F(Y)},Y)$, sea $\Theta = \{h: (g_0,X) \longrightarrow (id_{F(Y)},Y) \mid h \text{ y } f \text{ son } (n-1)\text{-homótopas rel. } A\}$ (Θ es una $(n-1)$ clase de homotopía propia rel. A). Notar que cada $h \in \Theta$ tiene asociado un elemento $\chi^n(f,h)$ de $\text{Coker } \zeta_n(f)$.

Definición 4.10: Un elemento $a \in \text{Coker } \zeta_n(f)$ se dice f -admisibles si existe $h \in \Theta$ tal que $\chi^n(f,h) = a$. Denotamos por $A_n(f)$ el conjunto de los elementos f -admisibles.

Proposición 4.11: Si f y h son dos aplicaciones propias que pertenecen a la misma clase de $(n-1)$ -homotopía propia rel. A , Θ entonces $A_n(f) = \chi^n(f,h) + A_n(h)$.

Teorema 4.12: El conjunto de n -clases de homotopía propia rel. A contenidas en una $(n-1)$ clase de homotopía propia Θ está en correspondencia biyectiva con el conjunto $A_n(f)$, donde f es una aplicación propia representante de Θ .

La demostración de estos teoremas se omite pues es análoga a la de sus correspondientes en obstrucción standard [5].

5. OBSTRUCCIONES PROPIAS PRIMARIAS

En este párrafo, supondremos que el espacio Y , además de las usuales condiciones de simplicidad del párrafo anterior, satisface que es $(\pi)(n-1)$ -conexo y que $\pi_i(Y, a_q) = 0$ para cada final propio a_q de Y , $0 < i \leq n-2$, $n \geq 2$.

Sean $\alpha_1, \dots, \alpha_k: J \longrightarrow Y$ aplicaciones propias tales que $\alpha_1(0) = \dots = \alpha_k(0)$ y que representan a los finales de Y a_1, \dots, a_k respectivamente. Dado un objeto (g_0, X) en $CWPRF(Y)$, puede definirse una aplicación propia $\eta: X \longrightarrow Y$ tal que si σ es una celda compacta, η la aplica en el punto $\alpha_1(0) = \dots = \alpha_k(0)$ y si σ es una celda no compacta tal que su aplicación característica $h_\sigma: E^{m-1} \times J \longrightarrow X$ satisface $F(h_\sigma)(\infty_{E^{m-1} \times J}) \in g_0^{-1}(a_q)$ entonces $F(\eta) \circ F(h_\sigma)(\infty_{E^{m-1} \times J}) = a_q$. Para definir η utilizaremos que X es σ -compacto y por tanto puede construirse una sucesión creciente de subespacios compactos $\{K_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ tal que

$$K_0 \subset \text{int } K_1 \subset K_1 \subset \text{int } K_2 \subset \dots$$

verificando que K_0 contiene todas las celdas compactas de X y que para cada $i \geq 0$ el número de arco-componentes de $X - K_i$ es $F(X)$. Teniendo en cuenta la partición $F(X) = g_0^{-1}(a_1) \cup \dots \cup g_0^{-1}(a_k)$ y que para la anterior sucesión $F(X) \cong \lim \pi_0(X - K_i)$, cada arco-componente C de $K_1 - \text{int } K_0$ determina un único final a_q , entonces se define

$\eta_1: K_1 \longrightarrow Y$ del modo siguiente:

$$1) \text{ Si } x \in K_0 \quad \eta_1(x) = \alpha_1(0) = \dots = \alpha_k(0)$$

2) Si $x \in K_1 - \text{int } K_0$: Sea C la arco-componente de x en $K_1 - \text{int } K_0$. $C \cap K_0$ y $C \cap \text{Fr}(K_1)$ son dos cerrados disjuntos del T_2 compacto C , y por tanto, al ser C normal, existe una aplicación continua $f_C: C \longrightarrow [0, 1]$ tal que $f_C(C \cap K_0) = 0$ y $f_C(C \cap \text{Fr}(K_1)) = 1$. Entonces, si a_q es el final de Y determinando por C , definimos

$$\eta_1(x) = \alpha_q(f_C(x)).$$

A continuación, de nuevo cada componente C de $K_2 - \text{int } K_1$ determina un final $a_{q(C)}$ de Y . De nuevo, por el Lema de Uryshon, existe $f_C: C \longrightarrow [1, 2]$ tal que $f_C(C \cap K_1) = 1$ y $f_C(C \cap \text{Fr}(K_2)) = 2$. Por tanto ahora se define

$\eta_2: K_2 \longrightarrow Y$ del modo siguiente:

$$1) \eta_2(x) = \eta_1(x) \quad \text{si } x \in K_1$$

$$2) \eta_2(x) = \alpha_{q(C)}(f_C(x)) \quad \text{si } x \in C$$

Procediendo por inducción se obtiene la aplicación η .

Dada una aplicación propia $f: A \longrightarrow Y$ tal que $F(f) = g_0 \circ F(i)$, debido a las condiciones sobre Y , deducimos que existe una $(n-1)$ -homotopía propia $H: I \times A_{n-1} \longrightarrow Y$

entre $\eta|_A$ y f . Al elemento de $\mathcal{G}^n(g_0F(i), A; \varphi_n(Y))$ representado por $\Delta^n(\eta|_A, H, f)$ lo denotamos por $\chi^n(f)$ y lo llamamos elemento característico de f . Veremos a continuación que $\chi^n(f)$ no depende de la elección de H :

Lema 5.1: Sea $f: A \longrightarrow Y$ una aplicación propia y $h, h': \bar{X}_n \longrightarrow Y$ extensiones propias de f . Entonces $sc^{n+1}(h)$ es cohomologo a $sc^{n+1}(h')$.

Demostración: Como $\pi_1(Y) = 0$, h y h' son 1-homótopas propiamente. Ahora, por ser $\varphi_r(Y) = 0$ para $1 < r \leq n-1$, del Teorema 4.8, se deduce que existe una homotopía propia $H: I \times \bar{X}_{n-1} \longrightarrow Y$ de h a h' . Entonces $\delta\Delta^n(h, H, h') = sc^{n+1}(h') - sc^{n+1}(h)$.

Proposición 5.2: Sean $\eta|_A, f': A \longrightarrow Y$ aplicaciones propias homótopas propiamente a $\eta|_A$ y f respectivamente y sean $H, H': I \times A_{n-1} \longrightarrow Y$ homotopías propias $H: \eta|_{A_{n-1}} \simeq_p f|_{A_{n-1}}$ y $H': \eta|_{A_{n-1}} \simeq_p f'|_{A_{n-1}}$. Entonces $\Delta^n(\eta|_A, H', f') \sim \Delta^n(\eta|_A, H, f)$.

Demostración: Consideramos el par $(I \times A, 0 \times A \cup 1 \times A)$ y las aplicaciones propias

$$G = (\eta|_A, H, f), \quad G' = (\eta|_A, H', f'): (\overline{I \times A})_n \longrightarrow Y,$$

donde $\overline{I \times A}_n = 0 \times A \cup I \times A_{n-1} \cup 1 \times A$.

Notar que $G|_{0 \times A \cup 1 \times A} \simeq_p G'|_{0 \times A \cup 1 \times A}$. Como Y es $(\pi)(n-1)$ -conexo y $\underline{\tau}_i(Y, a_q) = 0$ ($0 < i \leq n-2$) para cada final propio a_q de Y , se sigue que $G|_{(\overline{I \times A})_{n-1}} \simeq_p G'|_{(\overline{I \times A})_{n-1}}$. Aplicando PAEHP $G|_{(\overline{I \times A})_n} \simeq_p L_1$ siendo $L_1: (\overline{I \times A})_n \longrightarrow Y$ una aplicación propia tal que $L_1|_{(\overline{I \times A})_{n-1}} = G'|_{(\overline{I \times A})_{n-1}}$. Como consecuencia del Lema 3.8 $sc^{n+1}(G) = sc^{n+1}(L_1)$. Por otra parte, G' y L_1 son extensiones propias de $G'|_{0 \times A \cup 1 \times A}$. Por lo tanto, del Lema 5.1, $sc^{n+1}(G') \sim sc^{n+1}(L_1)$. Como $\Delta^n(G) = sc^{n+1}(G) \circ k$ y $\Delta^n(G') = sc^{n+1}(G') \circ k$ donde

$$k: SC_n(g_0 \circ F(i), A) \longrightarrow SC_{n+1}(g_0 \circ F(i), I \times A, \partial I \times A)$$

es un isomorfismo, se sigue que $\Delta^n(G) \sim \Delta^n(G')$.

Volvemos al elemento característico de f . Como $\pi_1(Y) = 0$, f es 2-extensible propiamente. Además, como $\varphi_r(Y) = 0$ para $1 < r \leq n-1$, $\mathcal{G}^{r+1}(g_0, X, A; \varphi_r(Y)) = 0$ y por tanto $sc^{r+1}(f) = 0$, luego por el Teorema 3.6, f es n -extensible propiamente sobre (g_0, X) . Así el primer conjunto obstrucción no trivial es $\theta^{n+1}(f)$. Por otra parte si $H: f|_{A_{n-1}} \simeq_p \eta|_{A_{n-1}}$, aplicando PAEHP existe $f': A \longrightarrow Y$ tal que $f' \simeq_p f$ y $f'|_{A_{n-1}} = \eta|_{A_{n-1}}$; así, por la Proposición 3.2, $\theta^{n+1}(f) = \theta^{n+1}(f')$. Como consecuencia podemos considerar que $f|_{A_{n-1}} = \eta|_{A_{n-1}}$ y que la homotopía H utilizada para definir el elemento característico de f es constante.

Proposición 5.3: $\theta^{n+1}(f)$ consta de un único elemento $\omega^{n+1}(f) = \delta^* \chi^n(f) \in \mathcal{G}^{n+1}(g_0, X, A; \varphi_n(Y))$ que se llamará obstrucción propia primaria a extender f . $(\delta^*: \mathcal{G}^n(g_0 \circ F(i), A; \varphi_n(Y)) \longrightarrow \mathcal{G}^{n+1}(g_0, X, A; \varphi_n(Y)))$ es el homomorfismo coborde de la sucesión exacta de cohomología asociada a (g_0, X, A) .

Demostración: Como $f|_{A_{n-1}} = \eta|_{A_{n-1}}$, f tiene una extensión propia $f_n: \bar{X}_n \longrightarrow Y$ tal que f_n coincide con η en $\bar{X}_n - A$. Además $f|_{X_{n-1}} \simeq_p \eta|_{X_{n-1}}$ a través de una homotopía constante. Notar que $\Delta^n(\eta|_{X_n}, f_n) \in SC^n(g_0, X; \varphi_n(Y))$ es la extensión trivial de $\Delta^n(\eta|_A, f)$. Por tanto $\omega^{n+1}(f)$ está representado por $\delta \Delta^n(\eta|_{X_n}, f_n) = sc^{n+1}(f_n) - sc^{n+1}(\eta|_{X_n})$ pero $sc^{n+1}(\eta|_{X_n}) = 0$ pues η está definida en todo X , y por consiguiente $\omega^{n+1}(f) \in \theta^{n+1}(f)$.

Supongamos ahora que $[sc^{n+1}(g)] \in \theta^{n+1}(f)$ donde $g: \bar{X}_n \longrightarrow Y$ es una extensión propia de f . Del Lema 5.1 se sigue inmediatamente que $[sc^{n+1}(g)] = \omega^{n+1}(f)$.

Consideremos ahora dos aplicaciones propias $f, h: (g_0, X) \longrightarrow (id_F(Y), Y)$ tales que $f|_A = h|_A$. Debido a las hipótesis sobre Y , f y h son $(n-1)$ homótopas propiamente rel.A. Entonces se tiene:

Proposición 5.4: El conjunto obstrucción propia $\theta^n(f, g)$ consta de un único elemento $\omega^n(f, g)$ que se llamará obstrucción propia primaria a extender la homotopía propia rel.A. Además se verifica que $j^* \omega^n(f, g) = \chi^n(f) - \chi^n(g)$. ($j^*: \mathcal{G}^n(g_0, X, A; \varphi_n(Y)) \longrightarrow \mathcal{G}^n(g_0, X; \varphi_n(Y))$ es el homomorfismo, inducido por la inclusión, de la sucesión exacta de cohomología asociada a (g_0, X, A)).

Corolario 5.5: 1) $\zeta_n(f)(R^n(X, A; f)) = 0$
2) $\text{Coker } \zeta_n(f) \cong \mathcal{G}^n(g_0, X, A; \varphi_n(Y))$.

Como en la teoría standard, un elemento x de $\mathcal{G}^n(g_0 F(i), X, A; \varphi_n(Y))$ se dice extensible sobre (g_0, X) si $x \in \text{Im } \mathcal{G}^n(i)$ donde $\mathcal{G}^n(i): \mathcal{G}^n(g_0, X; \varphi_n(Y)) \rightarrow \mathcal{G}^n(g_0 F(i), A; \varphi_n(Y))$ es el homomorfismo inducido por la inclusión de A en X . Además se obtienen los siguientes resultados:

Proposición 5.6: Dado (g_0, X, A) , para una aplicación propia $f: A \longrightarrow Y$ son equivalentes:

- (1) f es $(n+1)$ -extensible propiamente sobre (g_0, X)
- (2) $\omega^{n+1}(f) = 0$
- (3) $\chi^n(f)$ es extensible sobre (g_0, X) .

Proposición 5.7: Dos aplicaciones propias $f, h: (g_0, X) \longrightarrow (id_{F(Y)}, Y)$ tales que $f|_A = h|_A$ son n -homótopas propiamente rel. A si y solo si $\omega^n(f, h) = 0$.

Corolario 5.8: Para dos aplicaciones propias $f, h: (g_0, X) \longrightarrow (id_{F(Y)}, Y)$ son equivalentes:

- (1) f y h son n -homótopas propiamente
- (2) $\omega^n(f, h) = 0$.
- (3) $\chi^n(f) = \chi^n(h)$.

6. TEOREMAS DE CLASIFICACION PARA HOMOTOPIA PROPIA

Finalmente, con las mismas hipótesis iniciales que en el párrafo 5, vamos a dar algunos teoremas de clasificación para aplicaciones propias.

Sea $f: (g_0, X) \longrightarrow (id_{F(Y)}, Y)$ una aplicación propia. Se considera el conjunto $\{h: (g_0, X) \longrightarrow (id_{F(Y)}, Y) | h \text{ es propia y } f|_A = h|_A\}$. Debido a las condiciones sobre Y , sabemos que hay únicamente una clase de $(n-1)$ homotopía propia rel. A . El siguiente Teorema, dará una clasificación de tipo cohomológico del conjunto de las clases de n -homotopía propia rel. A .

Teorema 6.1: Si Y es $(\pi)r$ -simple y $(\tau)(r-1)$ -simple, y $\mathcal{G}^{r+1}(g_0, X, A; \phi_r(Y)) = 0$ para cada entero r tal que $n < r < \dim(X - A)$, entonces las n -clases de homotopía propia rel. A están en correspondencia (1-1) con los elementos del grupo $\mathcal{G}^n(g_0, X, A; \phi_n(Y))$. La correspondencia aplica la n -clase Θ_n representada por h en el elemento $\omega^n(f, h) \in \mathcal{G}^n(g_0, X, A; \phi_n(Y))$.

Demostración: Por el Corolario 5.5 (2), sabemos que $\text{Coker } \zeta_n(f) \cong \mathcal{G}^n(g_0, X, A; \phi_n(Y))$. Ahora bien, para cada elemento c de $\mathcal{G}^n(g_0, X, A; \phi_n(Y))$, existe una aplicación propia $h: (g_0, X) \longrightarrow (id_{F(Y)}, Y)$ tal que $f|_A = h|_A$ y $\omega^n(f, h) = c$. En efecto, de la Proposición 3.11 deducimos que existe una aplicación propia $g: \bar{X}_n \longrightarrow Y$ tal que $f|_{\bar{X}_{n-1}} = g|_{\bar{X}_{n-1}}$ y $\Delta^n(f, h) = z$, donde z es un cociclo que representa a c . Entonces, como $sc^{n+1}(f) = 0$ y $0 = \delta \Delta^n(f, h) = sc^{n+1}(g) - sc^{n+1}(f)$, se deduce del Teorema 3.6 que g se extiende propiamente a \bar{X}_{n+1} . Ahora aplicando reiteradamente el Teorema 3.11 se obtiene una extensión propia de g , $h: (g_0, X) \longrightarrow (id_{F(Y)}, Y)$ tal que $f|_A = h|_A$. Es inmediato que $\omega^n(f, h) = c$. Así cada elemento de $\text{Coker } \zeta_n(f)$ es admisible, luego $A_n(f) = \mathcal{G}^n(g_0, X, A; \phi_n(Y))$. A continuación basta aplicar el Teorema 4.12.

Teorema 6.2: Si Y es $(\pi)r$ -simple y $(\underline{\pi})(r-1)$ -simple, y $\mathcal{G}^{r+1}(g_0, X, A; \varphi_r(Y)) = 0 = \mathcal{G}^r(g_0, X, A; \varphi_r(Y))$ para cada r tal que $n < r \leq \dim(X-A)$, entonces el conjunto de clases de homotopía propia rel. A de aplicaciones propias del tipo $(g_0, X) \longrightarrow (\text{id}_F(Y), Y)$, que denotamos $[g_0, X, Y]_p^A$ está en correspondencia (1-1) (definida como en el Teorema 6.1) con los elementos de $\mathcal{G}^n(g_0, X, A; \varphi_n(Y))$.

Notar que si además $\underline{\pi}_{n-1}(Y, a_q) = 0$ para cualquier final propio a_q de Y , entonces para cada aplicación $g_0: F(X) \longrightarrow F(Y)$, $[g_0, X, Y]_p^A$ está en correspondencia (1-1) con $H^n(X, A; \pi_n(Y))$, pues en este caso $\mathcal{G}^n(g_0, X, A; \varphi_n(Y))$ es $H^n(X, A; \pi_n(Y))$. Por lo tanto hay tantas clases de homotopía propia de aplicaciones propias de X en Y rel. A como aplicaciones del conjunto de finales propios de X en el conjunto de finales propios de Y multiplicado por el cardinal de $H^n(X, A; \pi_n(Y))$.

Ejemplo: Vamos a clasificar las clases de homotopía propia de aplicaciones propias del interior M de una p.l. variedad N compacta orientable con borde, en el espacio producto $S^m \times R$.

Calculamos en primer lugar los grupos de homotopía π_q y homotopía propia $\underline{\pi}_q$ y $\underline{\pi}_q$ del espacio $Y = S^m \times R$:

1) Es obvio que $\pi_q(Y) \cong \pi_q(S^m)$,

2) En [1] Čerin demuestra que $\underline{\pi}_q(X, \alpha) \cong \pi_q(T(\hat{X}, \infty), p_\alpha)$, donde \hat{X} denota la compactificación de Alexandroff de X por el punto ∞ . $T(\hat{X}, \infty) = \{h: I \longrightarrow X \mid h(t) = \infty \text{ si y solo si } t = 1\}$ (espacio tangente en ∞ , definido por Hu en [6]) y $p_\alpha: (I, 1) \longrightarrow (\hat{X}, \infty)$ es el camino definido por $p_\alpha(t) = \alpha(t/(1-t))$ si $0 \leq t < 1$ y $p_\alpha(1) = \infty$. Como ∞ es un punto cónico en Y , tiene un entorno cónico, podemos aplicar el Teorema 14.5 de [6] y obtenemos que $\underline{\pi}_q(Y, \alpha) \cong \pi_q(S^m, *)$ para cada $q \geq 1$. Además es fácil ver Y tiene dos finales propios.

3) Para calcular $\underline{\pi}_q(Y, \alpha)$ consideramos la sucesión exacta que relaciona los grupos π_q , $\underline{\pi}_q$ y $\underline{\pi}_q$

$$\cdots \longrightarrow \underline{\pi}_{q+1}(Y, \alpha) \longrightarrow \pi_{q+1}(Y, \alpha(0)) \longrightarrow \underline{\pi}_q(Y, \alpha) \longrightarrow \underline{\pi}_q(Y, \alpha) \longrightarrow \cdots$$

Por la forma en que están definidos, los homomorfismos $\underline{\pi}_q(Y, \alpha) \longrightarrow \pi_q(Y, \alpha(0))$ son isomorfismos para $q \geq 1$, luego $\underline{\pi}_q(Y, \alpha) = 0$ para $q \geq 1$. Calculemos $\underline{\pi}_0(Y, \alpha)$, para ello estudiamos la anterior sucesión exacta en las dimensiones bajas:

$$\cdots \longrightarrow \underline{\pi}_1(Y, \alpha) \longrightarrow \pi_1(Y, \alpha(0)) \longrightarrow \underline{\pi}_0(Y, \alpha) \longrightarrow \underline{\pi}_0(Y, \alpha) \longrightarrow \pi_0(Y, \alpha(0))$$

si $m > 1$ $\pi_1(Y, \alpha(0)) = \pi_0(Y, \alpha(0)) = 0$, luego $\underline{\pi}_0(Y, \alpha) \cong \underline{\pi}_0(Y, \alpha)$,

si $m = 1$ $\underline{\pi}_1(Y, \alpha) \cong \pi_1(Y, \alpha(0)) \cong \mathbb{Z}$, y $\pi_0(Y, \alpha(0)) = 0$ luego $\underline{\pi}_0(Y, \alpha) \cong \underline{\pi}_0(Y, \alpha)$. Con esto conocemos todas las $\varphi_q(Y)$

$$\begin{array}{rcl}
 0 & \begin{array}{c} \nearrow \\ \longrightarrow \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ 0 \end{array} & \text{si } q < m, \\
 \mathbb{Z} & \begin{array}{c} \nearrow \\ \longrightarrow \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ 0 \end{array} & \text{si } q = m, \\
 \mathbb{Z} & \begin{array}{c} \nearrow \\ \longrightarrow \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ 0 \end{array} & \text{si } q = m+1, \\
 \pi_q(S^m) & \begin{array}{c} \nearrow \\ \longrightarrow \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ 0 \end{array} & \text{si } q > m+1.
 \end{array}$$

Supongamos que $\dim M < m$. Una vez hecha la elección de aplicación g entre los finales de M y los finales de Y , $[g, M, Y]_p = 0$, es decir, hay tantas clases de homotopía propia de aplicaciones propias entre M e Y como aplicaciones del conjunto de finales propios de M (número de componentes borde de la p.l. variedad N) en el conjunto $\{0,1\}$.

$\dim M = m$, para cada elección de g , $\mathcal{G}^m(g, M; \varphi_m(Y))$ es $H^m(M; \mathbb{Z})$. Para calcular $H^m(M; \mathbb{Z})$ utilizamos el Teorema de los Coeficientes Universales:

$$H^m(M; \mathbb{Z}) \cong \text{Ext}(H_{m-1}(M); \mathbb{Z}) \oplus \text{Hom}(H_m(M); \mathbb{Z}).$$

Como $\dim M = m$, $H_m(M) = 0$ y $H^m(M; \mathbb{Z}) \cong \text{Ext}(H_{m-1}(M); \mathbb{Z})$.

Calculemos $H_{m-1}(M)$: De la Proposición 9.1 de [2] y teniendo en cuenta que $H_i(M) \cong H_i(N)$ se obtiene:

$$H_{m-1}(M) \cong H^1(N, \partial N).$$

Utilizando otra vez el Teorema de los Coeficientes Universales

$$H^1(N, \partial N) \cong \text{Ext}(H_0(N, \partial N); \mathbb{Z}) \oplus \text{Hom}(H_1(N, \partial N); \mathbb{Z}).$$

Como $H_0(N, \partial N)$ y $\text{Hom}(H_1(N, \partial N); \mathbb{Z})$ son grupos abelianos libres, $H_{m-1}(M)$ también lo es, y en consecuencia $H^m(M; \mathbb{Z}) = 0$. Notar que obtenemos el mismo resultado que en el caso anterior.

$\dim M = m+1$, ahora solo podemos calcular las m -clases de homotopía propia. Estas, una vez hecha una elección de aplicación g , están en correspondencia 1-1 con los elementos del grupo $\mathcal{G}^m(g, M; \varphi_m(Y))$ que, como antes, es $H^m(M; \mathbb{Z})$.

$$H^m(M; \mathbb{Z}) \cong \text{Ext}(H_{m-1}(M); \mathbb{Z}) \oplus \text{Hom}(H_m(M); \mathbb{Z}).$$

$H_m(M) \cong H^1(N, \partial N)$ (Prop. 9.1 de [2] y $H_i(M) \cong H_i(N)$), en consecuencia $\text{Hom}(H_m(M); \mathbb{Z})$ es un grupo libre.

Por las mismas razones, $H_{m-1}(M) \cong H^2(N, \partial N)$.

BIBLIOGRAFIA

- [1] **Čerin Z.** "On various relative proper homotopy groups" Tsukuba J. Math. Vol 4 n° 2 177-202 (1980).
- [2] **Dold A.** "Lectures on Algebraic Topology". Springer-Verlag .1972
- [3] **Extremiana,J.I., Hernández,L.J., Rivas,M.T.:** "About the classification of proper maps in the category of the finite cubic complexes". Pub. Sem. Mat. García de Galdeano. Sección 1 n° 137. (1987).
- [4] **Extremiana,J.I., Hernández,L.J., Rivas,M.T.:** "Obstrucciones propias de tipo compacto - no compacto I" Revista de la Academia de Ciencias de Zaragoza, vease este mismo número.
- [5] **Hu S.T.** "Homotopy theory" Academic Press. (1959)
- [6] **Hu S.T.** "Algebraic local invariants of topological spaces" Compositio Math 13 173-218 (1958) -

HOMOTOPIA EN CATEGORIAS ADITIVAS*

S. RODRIGUEZ

Departamento de Matemática Fundamental. Facultad de Matemáticas.
Universidad de La Laguna. S/C. de Tenerife (España).

In [14] conditions to the existence of homotopy theory on a category A are given. These conditions were extracted of Huber's standar constructions [10] and completed with others, so that homotopy groups exact sequences could be defined and the principal properties of usual homotopy were verified. In this work it is analysed the particular case that A is an additive category. The original conditions are reduced enough, arrived in spite of it, to analogous results. The importance of this homotopy axiomatic on additive categories was in the fact that, in spite of its simplicity, it contains the more import homotopy theory defined on additive categories.

0.- INTRODUCCION

Este trabajo da una axiomatización de las teorías de homotopía definidas sobre categorías aditivas. La axiomatización de la homotopía se busca desde hace tiempo. Ya en 1955 Eckmann y Hilton [4] obtienen algunos resultados. Posteriormente, han surgido axiomáticas como las h - c -categorías de Heller [7], los complejos cúbicos de Kan [12], las categorías modelos de Quillen [13], las construcciones standar para categorías semi-simpliciales de Huber [10] y otras más actuales como las de Brown [2] y las de Baues [1]. Durante este proceso, o las axiomáticas no abarcaban todos los casos o surgía una nueva homotopía que no respetaba la axiomática. Por ahora, la que más casos engloba es la obtenida sobre las categorías de cofibraciones de Baues [1].

La axiomática desarrollada en este trabajo abarca todas las

(*) Este trabajo ha sido realizado con la ayuda de la Consejería de Educación de Canarias, proyecto nº 11, conv. 2-6-1987.

teorías de homotopía existentes sobre categorías aditivas, y sus axiomas son más manejables, por su simplicidad, que los de otras axiomáticas. A través de las construcciones cono o arcos, similares a las construcciones standar de Huber [10], siguiendo ideas análogas a las de Dieck, Kamps y Puppe [3] se desarrolla una teoría de homotopía que posee las propiedades más usuales de cualquier homotopía, relativas a grupos de homotopía, fibraciones y cofibraciones, sucesiones exactas de grupos de homotopías, etc...

El trabajo consta de cuatro partes, la primera dedicada a la obtención de los grupos de homotopía, la segunda analiza y estudia las cofibraciones y sus sucesiones, la tercera dualiza las dos partes anteriores y crea las sucesiones exactas de los grupos de homotopía y en la última se analizan ejemplos relativos a esta teoría.

A lo largo de todo el trabajo A representará una categoría aditiva con conúcleos, salvo en la última parte, donde se harán algunas distinciones. Las proyecciones e inclusiones se notarán por p e i con un subíndice de objetos si es suma directa y de morfismos si es (co)núcleo.

1.- GRUPOS DE HOMOTOPÍA

Toda teoría de homotopía lleva asociada una relación de equivalencia entre sus morfismos. En esta axiomática, la relación se obtiene definiendo nulhomotopía por factorización a través de un cono y extendiendo ésta, por medio de la suma, a homotopía.

Siguiendo este proceso, se define, primeramente, la noción de cono, obteniendo como consecuencia, la de morfismo nulhomotopo y, usando la suma, no olvidar que la categoría es aditiva, la de morfismos homotopos. Se crea así la categoría homotópica Ah y el funtor Π_0 , 0-grupo de homotopía, que mediante una suspensión, dará origen a los funtores Π_n , n -grupos de homotopía. Se finalizará analizando la homotopía de pares y la homotopía relativa.

1.1 Definición: Una construcción cono (C, k, p, q) sobre A consta de un funtor covariante $C: A \rightarrow A$ y de transformaciones naturales $k: 1 \rightarrow C$, $p: CC \rightarrow C$ y $q: CC \rightarrow CC$, verificando los siguientes axiomas:

C1: C transforma el objeto cero y los cuadrados cocartesianos en el objeto cero y cuadrados cocartesianos respectivamente.

C2: $p(kC) = 1$

C3: $q(kC) = Ck$ y $q(Ck) = kC$.

1.2 Definición: Un morfismo $f: A \rightarrow B$ se dice nulhomótopo ($f \approx 0$) cuando se factoriza a través de k_A , esto es, cuando existe un morfismo $F: CA \rightarrow B$ tal que $f = Fk_A$.

El conjunto de morfismos nulhomótopos desde A a B se representa por $Nul(A, B)$ y los morfismos cuyo dominio sea un cono se denominan nulhomotopías. La diferencia de dos morfismos nulhomótopos es, por la diferencia de las nulhomotopías respectivas, nulhomótopo y, por tanto, $Nul(A, B)$ es un subgrupo de $Hom(A, B)$ para todo par de objetos A y B de la categoría A . Al grupo cociente $Hom(A, B)/Nul(A, B)$ se denomina 0-grupo de homotopía de B respecto de A y se representa por $\Pi_0(A, B)$.

La homotopía surge ahora como consecuencia obvia:

$f, g: A \rightarrow B$, $f \approx g$ si y sólo si $f - g \approx 0$.

1.3 Proposición: La relación de homotopía " \approx " es compatible con la composición de morfismos.

Demostración:

Basta observar que si $f \approx 0$ por una nulhomotopía F entonces $fg \approx 0$ por la nulhomotopía FCg y $gf \approx 0$ por la nulhomotopía gF , donde Cg es el cono de g .

::

La categoría cociente A/\approx se denomina categoría homotópica de A y se representa por Ah . Una h -equivalencia es un morfismo de A cuya clase es un isomorfismo en Ah .

Los objetos contráctiles son aquellos cuya identidad es nulhomótopa y, por el axioma C2, se tiene que el cono de un objeto es contráctil. Utilizando la proposición 1.3 surgen como consecuencias inmediatas:

1.4 Corolario: $f \approx 0$ si y sólo si se factoriza a través de un objeto contráctil.

1.5 Corolario: Son equivalentes:

- (1) X contráctil
- (2) $\Pi_0(X, Y) = 0$, para todo objeto Y de A
- (3) $\Pi_0(Y, X) = 0$, para todo objeto Y de A .

El caracter funtorial de Π_0 viene expresado en el siguiente teorema:

1.6 Teorema: Para cualquier objeto A de A ,

- (1) $\Pi_0(A, -), \Pi_0(-, A): A \rightarrow Ab$
- (2) $\Pi_0(A, -), \Pi_0(-, A): Ah \rightarrow Ab$

son funtores aditivos, donde Ab es la categoría de los grupos abelianos.

Demostración:

Evidente usando la propiedad distributiva de la composición respecto de la suma y la proposición 1.3.

::

La categoría de pares de A , representada por $A(2)$ tiene como objetos los morfismos de A y como morfismos de f en g , los pares de morfismos (h_0, h_1) de $A \times A$ que conmutan con los anteriores, $h_1 f = g h_0$. El cono (C, k, p, q) de A induce en $A(2)$ el cono $(C, (k, k), (p, p), (q, q))$ y, por ser $A(2)$ aditiva, se obtienen resultados análogos a los anteriores.

Nótese que h_0 y h_1 pueden ser nulhomótopos por medio de nulhomotopías H_0 y H_1 y que en cambio, por ser $g H_0 \neq H_1 C f$, el morfismo (h_0, h_1) no serlo. Por otro lado, $1_f = (1_A, 1_B)$ ($f: A \rightarrow B$) y si A y B son contráctiles por nulhomotopías F y G respectivamente, entonces $f F = 1_B f F = G k_B f F = G C f k_A F = G C f 1_A = G C f$ y, por tanto, los objetos contráctiles de $A(2)$ si son aquellos que tienen su dominio y su codominio contráctiles.

Para la homotopía relativa, se considera la categoría bajo un objeto A , representada por A^A , cuyos objetos son los morfismos de A con dominio A y cuyos morfismos de un objeto (f, X) en otro (g, Y) son los morfismos $h: X \rightarrow Y$ que hacen el triángulo conmutativo: $h f = g$. El cono (C, k, p, q) de A induce un cono $(0, k \rho, p, q)$ en esta categoría, donde ρ es la proyección sobre el

conúcleo del objeto y el codominio de 0 es el cono del conúcleo del objeto: $\text{codom } 0 = \text{Coker}$. Esta categoría no es aditiva pero, usando la aditividad de A , se obtienen resultados análogos a los de A .

Obsérvese que el codominio de un morfismo nulhomótopo es el morfismo 0 y que, por tanto, los objetos contráctiles son los morfismos ceros con codominio contráctil. Por otro lado, si el objeto distinguido es el 0 , la homotopía relativa coincide con la homotopía normal.

Otras caracterizaciones de la homotopía relativa vienen dadas por el siguiente teorema:

1.7 Teorema: Sea $f: (g, X) \rightarrow (0, X')$, son equivalentes:

- (1) $f \approx 0$ (rel. A)
- (2) $\bar{f} \approx 0$, donde $\bar{f}: \text{coker } g \rightarrow X'$ es la inducida por f
- (3) Existe $F: CX \rightarrow X'$ tal que $f = Fk_X$ y $FCg = 0$.

Demostración:

(1) \Rightarrow (2) La nulhomotopía relativa a A de f es una nulhomotopía de \bar{f} , por la unicidad de la inducción.

(2) \Rightarrow (3) Sea F la composición de la nulhomotopía de \bar{f} con la proyección en el conúcleo de Cg . Las igualdades resultan por la unicidad de la inducción y por transformar el funtor C conúcleos en conúcleos.

(3) \Rightarrow (1) Una nulhomotopía relativa a A de f es la inducida por F en el conúcleo de Cg .

::

Se puede así definir, usando el funtor suspensión $S = \text{coker } k$, los grupos de homotopía de un objeto y los de pares de objetos como los funtores siguientes:

- (1) n -grupo de homotopía de B referido a A : $\Pi_n^A(B) = \Pi_0(S^n A, B)$
- (2) n -grupo de homotopía del par $g: X \rightarrow Y$ referido a A : $\Pi_n^A(Y, X) = \Pi_0(K_{S^{n-1}A}, g)$.

2.- COFIBRACIONES

Se verá que, en esta axiomática, las cofibraciones de Eckmann - Hilton, morfismos que poseen la propiedad de extensión de homotopía, y las de Serre, morfismos que poseen la propiedad

de extensión de nulhomotopía, coinciden.

Todo morfismo es composición de una cofibración con una h-equivalencia y, por medio de las cofibraciones inducidas mediante cuadrados cocartesianos, se le asocia funtorialmente tres sucesiones de cofibraciones equivalentes: la de cofibras homotópicas canónicas, la de cofibras homotópicas y la de Puppe.

Para las equivalencias anteriores se usarán relaciones entre retracts y retracts por deformación, viéndose que, en ambos casos, coinciden los diferentes tipos.

A menos que se diga lo contrario, en todo el párrafo, i representará un morfismo con dominio A y codominio B .

2.1 Definición: i es cofibración si para todo morfismo $f: A \rightarrow X$, $f \neq 0$ existe una extensión $f': B \rightarrow X$ tal que $f'i = f$.

2.2 Proposición: Son equivalentes:

- (1) i cofibración
- (2) Para todo X contráctil, $\text{Hom}(-, X)$ transforma i en un homomorfismo suprayectivo
- (3) $f: A \rightarrow X$, $f \neq 0$ entonces existe $f': B \rightarrow X$, $f' \neq 0$ y $f'i = f$
- (4) Ci tiene una retracción
- (5) $f \sim gi$ entonces existe $g' \sim g$ y $f = g'i$.

Demostración:

(1) \Rightarrow (2) Al ser X contráctil, todo morfismo es nulhomótopo y, por tanto, por (1) tiene una extensión.

(2) \Rightarrow (3) Por ser $f \neq 0$, se factoriza a través de un objeto contráctil. Por (2) existe una extensión de B a dicho objeto que compuesta con la nulhomotopía de f da una extensión de f . Evidentemente, esta extensión es nulhomótoma por factorizarse a través de un objeto contráctil.

(3) \Rightarrow (4) k_A , por (3) tiene una extensión. La composición del cono de dicha extensión con p_A es la retracción buscada.

(4) \Rightarrow (5) Sea F la nulhomotopía tal que $f - g_i = Fk_A$. Sea $g' = Frk_B$, donde r es la retracción existente por (4). $g' = g + g''$ verifica (5). Nótese que $g'' \neq 0$.

(5) \Rightarrow (1) Basta coger $g = 0$.

::

Fácilmente se comprueba que la composición de cofibraciones es cofibración y que si la composición de dos morfismos es cofibración, también lo es el primero. Si el cuadrado $\alpha_i i = i_\alpha \alpha$ es cocartesiano e i es cofibración, dado un morfismo $g \approx 0$ componible con α , se tiene que $g\alpha \approx 0$ y por 2.1 existe una extensión g' tal que $g'i = g\alpha$ y por cocartesianidad, existe h tal que $h\alpha_i = g'$ y $hi_\alpha = g$. Por tanto, la inducida de una cofibración por cocartesianidad es una cofibración. Nótese que una categoría aditiva con conúcleos posee cuadrados cocartesianos y, como consecuencia, cofibraciones inducidas. Por otro lado, si el dominio de una cofibración es contráctil, utilizando que su identidad es nulhomótopa y que el funtor C conserva cofibraciones y conúcleos, se tiene que la proyección sobre el conúcleo de la cofibración es una h -equivalencia.

Sea $f: X \rightarrow Y$ un morfismo y considérese $\langle f, k_X \rangle: X \rightarrow Y \otimes CX$:

2.3 Teorema:

- (1) $f = \rho_Y \langle f, k_X \rangle$
- (2) ρ_Y es h -equivalencia
- (3) $\langle f, k_X \rangle$ es cofibración

Demostración:

- (1) Evidente
- (2) $\rho_Y i_Y = 1_Y$, $1_{Y \otimes CX} - i_Y \rho_Y = i_{CX} \rho_{CX} \approx 0$.
- (3) Si $g: X \rightarrow Z$, $g \approx 0$ por nulhomotopía G , entonces $\{0, G\}: Y \otimes CX \rightarrow Z$ es una extensión

::

Si se consideran las definiciones usuales en homotopía de los diferentes tipos de retracts:

- (a) retracto débil, $ri \approx 1_A$
- (b) retracto, $ri = 1_A$
- (c) retracto por deformación débil, $ri \approx 1_A$, $ir \approx 1_B$
- (d) retracto por deformación, $ri = 1_A$, $ir \approx 1_B$
- (e) retracto por deformación fuerte, $ri = 1_A$, $ir = 1_B$ (rel. A).

Se tiene:

2.4 Teorema: Si i es cofibración, (a) \Leftrightarrow (b) \Leftarrow (c) \Leftrightarrow (d) \Leftarrow (e).

Demostración:

- (a) \Leftrightarrow (b) Si $ri \approx 1_A$, por ser i cofibración, existe

r' tal que $r'i = 1_A$.

(c) \Rightarrow (b) y (c) \Leftrightarrow (d) Como el anterior, observando que se puede conseguir $r' \simeq r$.

(d) \Leftrightarrow (e) Obsérvese que en los retracts por deformación, i es h -equivalencia.

Si $hi = i$, $h \simeq 1_B$, por una homotopía F , entonces $h' = h+h-hh = 2h-h^2 \simeq 1_B$ (rel. A) por la homotopía $FCh-F$.

Si $hi' = i$ y h tiene inversa homotópica a izquierda h' , entonces $i' \simeq h'hi' = h'i$ y, por ser i cofibración, existe $h'' \simeq h'$ y $h''i = i'$. Luego $h''hi' = i'$ y $h''h \simeq 1_B$, por lo anterior, $h''h+h''h-h''hh''h = (2h''-h''hh'')h \simeq 1_B$ (rel. A). Luego h tiene inversa homotópica (rel. A) a izquierda.

Si $hi' = i$ y h es h -equivalencia, por lo anterior, existe h' tal que $h'h \simeq 1_B$ (rel. A). Si h'' es la inversa homotópica de h , se tiene $h'' \simeq h'hh'' \simeq h'$ y, por tanto, h' es h -equivalencia con $h'i = i'$. Repitiendo el proceso, existe h''' tal que $h'h''' \simeq 1_B$ (rel. A) y $h''' \simeq h$. Luego h es h -equivalencia (rel. A).

$il_A = i$ e i h -equivalencia, por lo anterior, existe r tal que $ri = 1_A$ e $ir \simeq 1_B$ (rel. A).

\therefore

De este teorema surgen relaciones entre las diferentes h -equivalencias:

2.5 Teorema:

- (a) Si $gi = jf$, $j: X \rightarrow Y$, i, j cofibraciones y f, g h -equivalencias en A entonces (f, g) es h -equivalencia en $A(2)$
- (b) Si $fi = i'$, i' cofibración y f h -equivalencia, entonces $\bar{f}: \text{coker } i \rightarrow \text{coker } i'$, la inducida por f , es también h -equivalencia.

Demostración:

(a) Sean f' y g' las respectivas inversas homotópicas de f y g . Entonces $g'j \simeq if'$, y por ser j cofibración, existe g'' tal que $g''j = if'$. Sea $h = g''g - jFrk_B$, donde F es la homotopía entre $f'f$ y 1_A y r es la retracción de Ci . h es una h -equivalencia y $hi = i$, por el teorema anterior, h es h -equivalencia (rel. A). Sea $g''' = h'g''$, donde h' es la inversa homotópica (rel. X) de h . (f', g''') es una inversa homotópica a izquierda de (f, g) . Repitiendo el proceso con (f', g''') y usando la asociatividad de la composición se concluye el resultado.

(b) Por el teorema anterior f es h -equivalencia ($\text{rel. } A$) y como la inducción en los conúcleos es un funtor aditivo, por 2 de 1.7, se concluye el resultado.

∴

Todo morfismo $\alpha: A \rightarrow A'$ induce un funtor $\alpha_*: A^A \rightarrow A^{A'}$ definido, de forma natural, por cocartesianidad. Si se definen las metacategorías A^A , con objetos las clases de morfismos desde un objeto de A ; $\text{cof } A^A$, con objetos las clases de cofibraciones desde un objeto de A ; y como morfismos en ambas, las clases de equivalencias naturales de los funtores, se tiene:

2.6 Teorema:

(1) $-_*: A \rightarrow A^A, \text{cof } A^A, A^A h (\text{rel. } A), \text{cof } A^A h (\text{rel. } A)$ es un funtor covariante sobre cualquiera de las metacategorías del codominio.

(2) $-_*: A h \rightarrow \text{cof } A^A h (\text{rel. } A)$ es un funtor covariante.

Demostración:

(1) Todo, salvo la homotopía, son simples comprobaciones, algunas de las cuales ya han sido indicadas. Si $f \approx g$ ($\text{rel. } A$) mediante la homotopía F , se tiene $\alpha_1 F C i = \alpha_1 0 = 0 = 0 C_\alpha$ y, por conservar el funtor C la cocartesianidad, existe G única tal que $G C i_\alpha = 0$ y $G C \alpha_1 = \alpha_1 F$. G es la homotopía buscada que hace $\alpha_*(f) \approx \alpha_*(g)$ ($\text{rel. } A'$).

(2) Supóngase $\alpha_1 \approx \alpha_2$ mediante una homotopía $F: CA \rightarrow A'$. Sean $q_k: A' \oplus CA \rightarrow A'$ ($k = 1, 2$) definidas por $q_1 = \rho_{A'}$ y $q_2 = \rho_{A'} + F \rho_{CA}$. $i_{A'}$ se puede interpretar como un funtor $i_{A'}: \text{cof } A' \oplus CA^A h (\text{rel. } A' \oplus CA) \rightarrow \text{cof } A'^A h (\text{rel. } A')$ y considerar $(q_k)_j: i_{A'} \rightarrow (q_k)_*$, la inducida por cocartesianidad mediante una cofibración $j: A' \oplus CA \rightarrow B$, como una transformación natural.

Sean $G_k: CA' \oplus CCA \rightarrow A' \oplus CA$ definidas por $G_1 = 0 \oplus \rho_A$ y $G_2 = \{0, -F, 1_{CA} \triangleright \rho_A\}$. $G_k \approx 0$ y, por ser j cofibración, existe $H_k: CB \rightarrow B$ tal que $H_k C j = j G_k$. Como $(1 - H_k k_B) j = i_{A'} q_k$, existe j_k única tal que $j_k (q_k)_j = 1 - H_k k_B$ y $j_k j_\alpha = j i_{A'}$. Por otro lado, $(q_k)_j H_k C j = 0 = 0 C q_k$ y por cocartesianidad existe F_k única tal que $F_k C (q_k)_j = (q_k)_j H_k$ y $F_k C j_\alpha = 0$. F_k hacen $l^2 (q_k)_j j_k$ ($\text{rel. } A'$). Luego $(q_k)_\alpha$ son h -equivalencias relativas a A .

Sea $g: A \rightarrow A' \oplus CA$, $g = \alpha_1 + k_A$. Denótese por t la equivalencia natural que hace que $-_*$ conserve la composición. Entonces

$v = t(q_2^{-1}g_*)(q_1g_*)t: \alpha_{1*} = (q_1g)_* \rightarrow \alpha_{2*} = (q_2g)_*$ es una equivalencia natural.

∴

Nótese que $v_j(\alpha_1)_j \approx (\alpha_2)_j$ para toda cofibración j . Como consecuencias de este teorema, observando la forma que adoptan los cuadrados cocartesianos en categorías aditivas con conúcleos, se tiene:

2.7 Corolario: Si $\alpha: A \rightarrow A'$, $\alpha \neq 0$, e i cofibración entonces

(1) $i_\alpha: A' \rightarrow A_{(i,\alpha)}$ es h-equivalente relativo a A' a

$i_A: A' \rightarrow A' \oplus \text{coker } i$

(2) Si $f': \text{coker } j \rightarrow \text{coker } i$, la inducida por f , es h-equivalencia, entonces f_α , la inducida por cocartesianidad mediante α , es h-equivalencia relativa a A' .

Y usando las transformaciones naturales que hacen de $-_*$ un funtor entre las categorías ya señaladas:

2.8 Corolario: Si i es cofibración, entonces

(1) Si $\alpha: A \rightarrow A'$ es h-equivalencia, también lo es α_i

(2) Si A es un retracts por deformación fuerte de A' , entonces α_i es h-equivalencia relativa a A .

2.9 Definición: Un morfismo c se dice cofibra de otro f , si $cf = 0$ y para cualquier otro morfismo g tal que $gf = 0$ existe uno h tal que $hc = g$.

Si se cambia "=" por " \approx " se tiene el concepto de cofibra homotópica, que es, en particular, una cofibración.

De forma natural, dada una categoría A , se definen las metacategorías: $SA \uparrow$, sucesiones crecientes de morfismos en A y $SCA \uparrow$, sucesiones crecientes de cofibras en A . Si la categoría A es abeliana, $SEA \uparrow$ representa la metacategoría de las sucesiones exactas crecientes de morfismos en A . De esta forma, las sucesiones crecientes isomorfas en Ah , esto es, los objetos isomorfos en $SAh \uparrow$, se dirán h-equivalentes. Nótese que cualquier sucesión creciente h-equivalente a una de cofibras homotópicas es también de cofibras homotópicas. De forma análoga se definen las sucesiones decrecientes, \downarrow .

Si $F: A \rightarrow B$ es un funtor covariante (contravariante), se induce de forma obvia el funtor, que por simplificación se denota de igual forma, $F: SA \uparrow \rightarrow SB \uparrow$ ($SB \downarrow$) y, como consecuencia,

usando la proposición 1.6, se tiene la siguiente caracterización de los objetos de $SCAh\uparrow$:

2.10 Proposición: $\Pi_0(-, Z)(SCAh\uparrow)$ está contenido en $SEAb\uparrow$ y $\Pi_0(-, Z)^{-1}(SEAb\uparrow) = SCAh\uparrow$.

Dado un morfismo $g: A \rightarrow A'$, siempre se le puede asociar una cofibra homotópica canónica $g_1 = (k_A)_g$. Nótese que $R_1 = g_{k_A}$ es una nulhomotopía para $g_1 g$. Si se denota por C_g el codominio de g_1 , reiterando el proceso se obtiene la sucesión de cofibras homotópicas canónicas asociada al morfismo g :

2.11 Proposición: $F: A(2) \rightarrow SCAh\uparrow$ definido por

$$F(g) = A \xrightarrow{g} A' \xrightarrow{g_1} C_g \xrightarrow{g_2} C_{g_1} \xrightarrow{g_3} C_{g_2} \rightarrow \dots$$

es un funtor covariante.

Obsérvese que $SA = \text{coker } g_1$, surgiendo así la sucesión de Puppe asociada al morfismo g :

2.12 Proposición: $G: A(2) \rightarrow SAh\uparrow$ definido por

$$G(g) = A \xrightarrow{g} A' \xrightarrow{g_1} C_g \xrightarrow{\rho_{g_1}} SA \xrightarrow{sg} SA' \xrightarrow{sg_1} SC_g \xrightarrow{sp_{g_1}} S^2 A \rightarrow \dots$$

es un funtor covariante.

Nótese que $C_g = \text{coker} \langle g, -k_A \rangle$ y, usando el teorema 2.3 y el apartado (b) del 2.5, se tiene que la h -equivalencia proyección ρ_A induce, si g es cofibración, una h -equivalencia $e: C_g \rightarrow \text{coker } g$. Si se llama h la composición de la proyección ρ_{g_1} con una inversa homotópica de la h -equivalencia inducida, se obtiene la sucesión de cofibras homotópicas asociadas a una cofibración g :

2.13 Proposición: $H: \text{cof } A \rightarrow SAh\uparrow$ definido por

$$H(g) = A \xrightarrow{g} A' \xrightarrow{\rho_g} \text{coker } g \xrightarrow{h} SA \xrightarrow{sg} SA' \xrightarrow{sp_g} S \text{coker } g \xrightarrow{sh} S^2 A \rightarrow \dots$$

es un funtor covariante con dominio la metacategoría de cofibraciones de A .

Demostración:

Simple comprobación, observando que el funtor S es aditivo y que si $f \approx 0$ mediante una nulhomotopía F , entonces la inducida en el conúcleo por $Cf - k_B F$, ($B = \text{codom } f$) compuesto con ρ_{k_B} es Sf y, por tanto, $Sf \approx 0$ y, en consecuencia, S conserva la

homotopía.

::

2.14 Teorema:

- (1) $F(g)$ es h-equivalente a $G(g)$
- (2) Si g es cofibración, $H(g)$ es h-equivalente a $G(g)$.

Demostración:

(1) Por el mismo razonamiento que se usó para la creación de la sucesión de cofibras homotópicas, existe una h-equivalencia $e_n: C_{g_n} \rightarrow SC_{g_{n-3}}$. Por naturalidad de k , $k_{C_{g_{n-2}}} g_{n-1} = C_{g_{n-1}} k_{C_{g_{n-3}}}$ y, por cocartesianidad, existe $M: C_{g_{n-1}} \rightarrow CC_{g_{n-2}}$ tal que $MR_n = C_{g_{n-1}}$ y $Mg_n = k_{C_{g_{n-2}}}$, y de esto último, usando de nuevo cocartesianidad existe $N: C_{g_n} \rightarrow CC_{g_{n-2}}$ tal que $NR_{n+1} = 1_{CC_{g_{n-2}}}$ y $Ng_{n+1} = M$. Finalmente, por la unicidad de la cocartesianidad, $\rho_{g_{n+1}} + Sg_{n+2} e_n = \rho_{k_{C_{g_{n-2}}}}$ $N \approx 0$, por factorizarse a través de un cono. De donde $Sg_{n+2} e_n \approx -\rho_{g_{n+1}} = (-e_{n+1})_{g_{n+2}}$.

Luego la sucesión de cofibras homotópicas canónicas asociada al morfismo g es h-equivalente mediante $(1_A, 1_{A'}, 1_{C_g}, e_1, -e_2, e_3, -e_4, \dots)$ a la sucesión

$A \xrightarrow{g} A' \xrightarrow{g_1} C_g \xrightarrow{\rho_{g_1}} S(F)$. Aplicando el funtor S sucesivamente a esta h-equivalencia se concluye el resultado.

(2) Si g es cofibración, $(1_A, 1_{A'}, e, 1_{SA}, 1_{SA'}, Se, 1_{S^2A}, \dots)$ hace h-equivalentes a $G(g)$ y $H(g)$.

::

Como consecuencia de este teorema, los funtores G y H se pueden también considerar con codominio $SCAh\uparrow$. Si en el cuadrado cocartesiano $g_i i = i_g g$, i cofibración y g epimorfismo, entonces el cuadrado $R_{(1)i} C_i = G_3(i, i_g) R_1$ es cocartesiano; además, C_i tiene una retracción que hace de CA un retracts por deformación de CB y por el teorema 2.6, entonces C_g es un retracts por deformación de C_{g_i} a través de $G_3(i, i_g)$. De lo cual se concluye

que $G_{3n}(i, i_g)$ y $H_{3n}(i, i_g)$ son h-equivalencias.

3.- DUALIDAD

Todo lo dicho hasta aquí, tiene una teoría dual: Si A es una categoría aditiva con núcleos y una construcción arcos (C', k', p', q') , esto es, un funtor covariante $C': A \rightarrow A$ y transformaciones naturales $k': C' \rightarrow 1$, $p': C' \rightarrow C'C'$ y $q': C'C' \rightarrow C'C'$ verificando $C'1: C'$ transforma el objeto cero y los cuadrados cartesianos en el objeto cero y cuadrados cartesianos, respectivamente, $C'2: (k'C')p' = 1$ y $C'3: (k'C')q' = C'k'$ y $(C'k')q' = k'C'$, utilizando el funtor lazos $\Omega = \ker k'$, se definen de forma dual los grupos de homotopía de un objeto y de un par referidos a un objeto. Así mismo, definiendo fibraciones como los morfismos que verifican la propiedad de elevación de homotopía, a través de las fibraciones inducidas por cuadrados cartesianos, se llega a la creación de las tres sucesiones de fibras homotópicas duales equivalentes: la canónica, la de Eckmann - Hilton y la asociada a una fibración.

En una categoría A aditiva con núcleos, conúcleos, una construcción cono y otra arcos, existen dos homotopías, en principio, diferentes. En este párrafo se estudia cuándo estas homotopías son coincidentes, utilizando para ello el concepto de adjunción, y obteniendo, las sucesiones exactas de grupos de homotopía.

La adjunción que se utilizará es la de Kan, esto es, C es adjunto a izquierda de C' o, equivalentemente, C' es adjunto a derecha de C , si y sólo si existe una equivalencia natural $t: \text{Hom}(C-, -) \rightarrow \text{Hom}(-, C'-)$.

3.1 Definición: Dos construcciones cono-arcos (C, k, p, q) y (C', k', p', q') se dirán adjuntas, cuando C es adjunto a izquierda de C' mediante una equivalencia natural que hace $k \cong k'_*$, $p \cong p'_*$ y $q \cong q'_*$.

Nótese que al ser $k \cong k'_*$, el funtor suspensión S es adjunto a izquierda del funtor lazos Ω y que, por tanto, los grupos de homotopía definidos por construcciones adjuntas son isomorfos,

esto es, $\Pi_0(S^n A, B) \cong \Pi_0(S^{n-1} A, \Omega B) \cong \dots \cong \Pi_0(SA, \Omega^{n-1} B) \cong \Pi_0(A, \Omega^n B)$.

Dada una construcción cono (C, k, p, q) , es suficiente tener un funtor adjunto a derecha C' de C para obtener construcciones cono-arcos adjuntas. Para ello basta definir $k' = kt^{-1}(1_{C', -})$, $p' = ttpt^{-1}(1_{C', -})$ y $q' = ttqt^{-1}t^{-1}(1_{C', C', -})$, donde se ha supuesto $k: \text{Hom}(C, -) \rightarrow \text{Hom}(-, -)$, $p: \text{Hom}(CC, -) \rightarrow \text{Hom}(C, -)$ y $q: \text{Hom}(CC, -) \rightarrow \text{Hom}(CC, -)$ definidas de forma obvia. De forma dual sucede con una construcción arcos y un funtor adjunto a izquierda.

Por otro lado, construcciones adjuntas en A inducen construcciones adjuntas en $A(2)$ y la homotopía relativa y su dual, la correlativa, pueden ser definidas usando arcos y conos, respectivamente.

A partir de aquí A se supondrá con construcciones adjuntas.

Si se considera el dominio de la fibra homotópica canónica como un funtor $F: A(2) \rightarrow A$, $F(g) = F_g$, se tiene

3.2 Proposición: Existe una equivalencia natural entre los funtores Π_1^A y $\Pi_0^A F$.

Demostración:

Sean $g: X \rightarrow Y$ y $(u, v): k_A \rightarrow g$, entonces $k_Y^{-1}t(v) = vk_A = gu$ y, por cartesianidad, existe una única $w: A \rightarrow F_g$ tal que $r^1 w = t(v)$ y $g^1 w = u$. $\theta_g(u, v) = w$; $\theta: \text{Hom}(k_A, -) \rightarrow \text{Hom}(A, F_-)$ es una equivalencia natural. Nótese que $\theta_g^{-1}(w) = (g^1 w, t^{-1}(r^1 w))$.

θ_g conserva la homotopía, pues si $(u, v) \approx 0$, se tiene que $w = hW$, donde $W = \theta_{C, g}(U, V)$, (U, V) es una nulhomotopía para arcos de (u, v) y $h = F'_3(u, v)$ (F' la dual de 2.11). Entonces w se factoriza a través de $F_{C, g}$, que es contráctil como consecuencia del teorema dual al 2.14 y, por tanto, $w \approx 0$.

θ_g^{-1} también conserva la homotopía, pues si $w \approx 0$, $(U, V) = (C'g^1 W, t^{-1}(q_B^{-1}C'r^1 W))$ es una nulhomotopía para arcos de (u, v) ; donde W es una nulhomotopía para arcos de v . θ es entonces la equivalencia natural deseada.

::

3.3 Teorema:

(1) $P: A(2) \rightarrow SEAb$ definida por $P(g) =$

$$= \Pi_0^A(Y) \xleftarrow{f^1} \Pi_0^A(X) \xleftarrow{f^2} \Pi_1^A(Y, X) \xleftarrow{f^3} \Pi_1^A(Y) \xleftarrow{f^4} \Pi_1^A(X) \xleftarrow{f^5} \Pi_2^A(Y, X) \xleftarrow{\dots}$$

donde $f^{3n-2} = g_*$, $f^{3n-1} = g_*^{-1} \theta_g$ y $f^{3n} = \theta_g^{-1} (i_{g,1})_* t^{-1}$ es un funtor covariante.

(2) $Q: fA \rightarrow SEAb$ definida por $Q(g) =$

$$= \Pi_0^A(Y) \xleftarrow{j^1} \Pi_0^A(X) \xleftarrow{j^2} \Pi_0^A(\ker g) \xleftarrow{j^3} \Pi_1^A(Y) \xleftarrow{j^4} \Pi_1^A(X) \xleftarrow{j^5} \Pi_1^A(\ker g) \xleftarrow{\dots},$$

donde $j^{3n-2} = g_*$, $j^{3n-1} = (i_g)_*$ y $j^{3n} = h'_* t$, (h' es dual de h en la proposición 2.13), es un funtor covariante.

Nótese que $f^{3n-1}([u, v]) = [u]$ y $f^{3n}([v]) = [0, i_{k_{S^{n-1}A}} v]$.

Por otro lado el cuadrado cartesiano sobre $g: Y \rightarrow B$ y $p: E \rightarrow B$, con p fibración y g monomorfismo, como consecuencia del teorema dual al 2.14, F_{g_p} es un dilatado por deformación de F_g a través de $h = F'_g(p_g, p)$ y, por tanto, h_* es un isomorfismo natural y, como $(p_g, p)_* = \theta_g^{-1} h_* \theta_{g_p}$ resulta que $\Pi_n^A(E, F_g) \cong \Pi_n^A(B, Y)$.

4.- EJEMPLOS Y RELACIONES

Todas las teorías de homotopía definidas sobre categorías aditivas, son ejemplos de este desarrollo. Así para la teoría proyectiva e inyectiva de Eckmann - Hilton [9], basta considerar la envoltura proyectiva e inyectiva, respectivamente, de los objetos. También en la homotopía de los complejos de cadenas [6], [11] sucede lo mismo considerando $C(X)_n = X_n \oplus X_{n-1}$. Toda homotopía obtenida a través de cilindros o caminos, puede ser también obtenida a través de conos o arcos, anulando las respectivas segundas inclusiones o proyecciones. Homotopías recientes han sido creadas y desarrolladas siguiendo este método, como la de grupos abelianos de L.J. Hernández [8] y la de R casi-módulos de M. Sanz [15] y, de forma análoga a éstas, se pueden definir otras sobre R módulos, grupos topológicos, espacios vectoriales topológicos, etc...

BIBLIOGRAFIA

- [1] Baues, H. J. On the homotopy classifications Problem. Preprint. 1983.
- [2] Brown, K. S. Abstract homotopy theory and generalized sheaf cohomology. Transactions of the AMS 186. (419-458). 1973.
- [3] Dieck, T.
Kamps, K. H.
Puppe, D. Homotopic theorie. Lecture Notes in Math. Nº 157. Springer-Verlag. 1970.
- [4] Eckmann, B.
Hilton, P. J. Groups like structures in general categories, I multiplications. Ann. of Math. 145. (227-255). 1962.
- [5] Felix, Y. Etude de quelques cofibrations formelle. Univ. des Sciences et Techniques de Lille. Vol. I, Fasc. II, Part. III. 1979.
- [6] Golasiński, M.
Gromazki, G. The homotopy category of chain complexes is a homotopy category. Colloquium Math. Vol. XLVII. Fasc. 2. (173-178).
- [7] Heller, A. Abstract homotopy in categories of fibrations and the spectral sequence of Eilemberg-Moore. J. Math. 16. 1972.
- [8] Hernández, L. J. Un ejemplo de teorías de homotopía en los grupos abelianos. Dpto. Geometría y Topología. Univ. de Zaragoza. 1985.
- [9] Hilton, P. J. Homotopy theory and duality. Nelson Gordon and Breach. 1965.
- [10] Huber, P. H. Homotopy theory and general category. Math. Annalen, 144. 1961.
- [11] Kamps, K. H. Kan-bedingungen und abstrakte homotopiëtheorie. Mathematische Zeitschrift, 124. (215-236). 1972.
- [12] Kan, D. M. Abstract homotopy I, II. Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 41. 1955.
- [13] Quillen, D. G. Homotopical algebra. Springer. Lect. Notes in Math. 43. 1967.
- [14] Rodríguez, S. J. Una axiomatización de la teoría de homotopía. Dpto. Geometría y Topología. Univ. de Zaragoza. 1985.
- [15] Sanz, M. Homotopía en R-casi-módulos. Dpto. Geometría y Topología. Univ. de Zaragoza. 1980.
- [16] Serre, S. P. Groupes d'homotopie et classes de groupes abéliens. Ann. of Math. 58. 1953.
- [17] Zisman, M. Espaces fibrés et groupes d'homotopie. Séminaire Henri CARTAN. E.N.S. 11e. année 1958/59.

A GLOBAL THEOREM FOR THE SOLUTIONS OF POLYNOMIAL EQUATIONS

I.K. ARGYROS

Department of Mathematical Sciences. New Mexico State University.
Las Cruces, NM 88003.

A new global theorem for the solutions of polynomial equations is provided. The result is obtained by splitting the polynomial equation in a system of two linear equations. $\gamma ?$

Introduction. With the exception of Rall's work on the solutions of polynomial operator equations on a normed space X all published existence theorems depend in some way on contraction mapping theorems [1], [9], and [10].

In this paper we prove a global theorem for the solution of the polynomial equation of order two (or quadratic equation)

$$P(x) = 0 \quad (1)$$

with

$$P(x) = B(x, x) + L(x) + y,$$

where B is a bilinear operator on X [9], L is a linear operator on X and y is fixed in X .

Our work was motivated from a question raised in [11, p. 395] concerning global theorems for the solutions of polynomial equations.

As in the case of the real quadratic equation, under certain assumptions we reduce the problem of solving equation (1) to a system of two linear equations that is easier to solve.

Our results can then immediately be extended to include polynomial equations of order n

$$P_n(x) = 0 \quad (2)$$

with

$$P_n(x) = M_n x^n + M_{n-1} x^{n-1} + \dots + M_2 x^2 + M_1 x + M_0.$$

The notation x^k denotes (x, x, \dots, x) and M_k , $k = 1, 2, \dots, n$ is a k -linear on X [4], [10], [11].

Finally an example is also provided.

Main results.

Let $L(X)$ denote the vector space of all linear operators on X . Denote by $B(y)$, $y \in X$ the linear operator defined on X by

$$B(y)(x) = B(y, x) \text{ for all } x \in X.$$

Proposition. Let A denote the set defined by

$$A = \{L \in L(X) / B(L(y)) = B(y)L, \text{ with } B, y \text{ as in (1)}\}.$$

Then A is a vector subspace of $L(X)$.

Proof. Obviously $A \neq \emptyset$ since the identity operator $I \in A$. Let c_1, c_2 be arbitrary numbers in the field of X and assume that L_1 and $L_2 \in A$.

Then

$$\begin{aligned} B(c_1 L_1 + c_2 L_2)(y) &= B(c_1 L_1(y) + c_2 L_2(y)) = c_1 B(L_1(y)) + c_2 B(L_2(y)) = \\ &= c_1 B(y)L_1 + c_2 B(y)L_2 = B(y)(c_1 L_1 + c_2 L_2) \end{aligned}$$

so, $c_1 L_1 + c_2 L_2 \in A$ and the proof is complete.

Note that the problem of finding a solution x of (1) can be reduced to finding a pair (x, L_1) , $x \in X$, $L_1 \in L(X)$ satisfying the system

$$B(x) + L = L_1 \quad (3)$$

$$L_1(x) + y = 0. \quad (4)$$

Definition. Let N_1 and N_2 denote two linear operators on X . Then the linear operator N_1 is a square root of N_2 if $N_2^2 = N_1$. In this case we denote N_2 by $N_2 = \sqrt{N_1}$.

We can now prove the main result.

Theorem 1. Assume:

(a) the square root of the linear operator $L^2 - B(y)$ denoted by S exists;

(b) the operator $L_1 \in L(X)$ given by $L_1 = \frac{L+S}{2}$ is invertible on X ;

(c) $L_1^{-1} \in A$;

and

(d) the linear operators L and S commute, that is $LS = SL$.

Then (1) has a solution x given by

$$x = -2(L + S)^{-1}(y). \quad (5)$$

Proof. By the previous remark it is enough to show that the pair (x, L_1) satisfies (3) and (4). If x is given by (5) then (4) is satisfied. Also,

$$L_1 = \frac{L+S}{2} \Rightarrow$$

$$L_1^2 - LL_1 + B(y) = 0 \quad (\text{by (a), (d)}) \Rightarrow$$

$$-B(y)L_1^{-1} + L = L_1 \quad (\text{by (b)}) \Rightarrow$$

$$B(-L_1^{-1}(y)) + L = L_1 \quad (\text{by (c)}) \Rightarrow$$

$$B(x) + L = L_1.$$

That is, (x, L_1) satisfies (3) and (4). Therefore x is a solution of (1).

Remark 1. If the operator L_1 is not invertible, we can still make use of the theorem. Let $P'(x_0)$, $P''(x_0)$ denote the first and second Fréchet derivative of P at x_0 [8]. As in [9], there is no loss of generality to assume that B is symmetric in (1). We then obtain using Taylor's theorem

$$P(x_0 + h) = P(x_0) + P'(x_0)(h) + \frac{1}{2} P''(x_0)(h, h) \quad (6)$$

where,

$$P'(x_0) = 2B(x_0) + L \quad \text{and} \quad P''(x_0) = 2B.$$

Equation (6) can now be written as

$$P(x_0 + h) = P(x_0) + P'(x_0)(h) + B(h, h).$$

The linear operator $P'(x_0)$ may now be invertible. We can then set $y = P(x_0)$ and $L = P'(x_0)$. If the rest of the hypotheses of the theorem are now satisfied we obtain a solution x in the form

$$x = x_0 + h$$

where h is given by (5).

Remark 2. Rall [9] has shown some elegant existence results if $P'(x_0)$ is invertible for second kind quadratic equations. However, the solution x if it exists lies in what he calls "factor set" which is not a vector space.

Remark 3. If the linear operator S does not exist the transformation in Remark 1 may produce an operator which is the square root of the new "discriminant" operator. However, if $B(x_0)$, $L \in A$ and live in a commutative algebra the transformation does not work, since

$$\begin{aligned} (2B(x_0) + L)^2 - 4B(P(x_0)) &= 4B(x_0)^2 + L^2 \\ + 2B(x_0)L + 2LB(x_0) - 4B(y) - 4B(L(x_0)) - 4B(B(x_0)x_0)) \\ &= L^2 - 4B(y). \end{aligned}$$

Applications

Remark 4. The real quadratic equation may serve as an example for the theorem. However, a more interesting example when $X = \mathbb{R}^2$ is now provided.

Example. Let $X = \mathbb{R}^2$ with the ordinary bases $\{(1, 0), (0, 1)\}$. It is well known [10] that a bilinear operator B on X is uniquely associated with an array of real numbers

$$T = \left[\begin{array}{cc|cc} \beta_1^{11} & \beta_1^{12} & \beta_2^{11} & \beta_2^{12} \\ \beta_1^{21} & \beta_1^{22} & \beta_2^{21} & \beta_2^{22} \end{array} \right]$$

with respect to the chosen ordered bases. In fact, we define B by the following calculation scheme if $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ and $y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$

$$\begin{aligned} B(x, y) &= \{(x_1, x_2)^{tr} T\} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \beta_1^{11}x_1 + \beta_1^{21}x_2 & \beta_1^{12}x_1 + \beta_1^{22}x_2 \\ \beta_2^{11}x_1 + \beta_2^{21}x_2 & \beta_2^{12}x_1 + \beta_2^{22}x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \end{aligned}$$

(a new form of vector-array multiplication)

$$= \begin{bmatrix} \beta_1^{11}x_1y_1 + \beta_1^{21}x_2y_1 + \beta_1^{12}x_1y_2 + \beta_1^{22}x_2y_2 \\ \beta_2^{11}x_1y_1 + \beta_2^{21}x_2y_1 + \beta_2^{12}x_1y_2 + \beta_2^{22}x_2y_2 \end{bmatrix} \quad (7)$$

(ordinary matrix-vector multiplication).

Then B is plainly bilinear and the array T is its representation with respect to the chosen basis. And, conversely, the value $B(x, y)$ of any

bilinear operator on X can be calculated using the above scheme.

We also observe that for any $x \in X$ the linear operator $B(x)$ on X has the ordinary 2×2 matrix representation.

$$B(x) = \begin{bmatrix} \beta_1^{11}x_1 + \beta_1^{21}x_2 & \beta_1^{12}x_1 + \beta_1^{22}x_2 \\ \beta_2^{11}x_1 + \beta_2^{21}x_2 & \beta_2^{12}x_1 + \beta_2^{22}x_2 \end{bmatrix}. \quad (8)$$

Consider now the quadratic equation X given by

$$B(x, x) + L(x) + y = 0 \quad (9)$$

where

$$B \approx \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix},$$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ \frac{3}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \text{ and } y = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} \end{bmatrix}.$$

Using (7) and (8), (9) can be written as

$$x_1^2 + x_1x_2 + 3x_1^2 - 2x_2 + \frac{1}{4} = 0$$

$$2x_1^2 + x_2^2 + \frac{3}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{4} = 0.$$

We now have that

$$\sqrt{L^2 - 4B(y)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -\frac{3}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = S$$

where

$$B(y) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{4} & -1 \\ \frac{3}{4} & 0 \end{bmatrix}. \text{ Also, } L + S = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Therefore,

$$L_1^{-1} = 2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \in A$$

and finally we obtain the solution

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

Note that this is a solution that we can find and not the only solution of (9).

Remark 5. Let $X = R^m$. For a bilinear operator $B = \{\beta_i^{jk}\}$, $i, j, k = 1, 2, \dots, n$ one can define as in [10]

$$\|B\| = \sup_{\|x\|=1} \max_{(i)} \sum_{j=1}^m \left| \sum_{k=1}^m \beta_i^{jk} x_k \right|,$$

from which it follows at once that

$$\|B\| \leq \max_{(i)} \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m |\beta_i^{jk}|.$$

A simple calculation shows that the norm of B given in the previous example is 6 for $m = 2$. Also, $\|y\| = \frac{1}{4}$. Moreover, the condition

$$1 - 4\|B\| \cdot \|y\| \geq 0$$

in [9] is violated. Therefore, the solution obtained in the previous example cannot be obtained using the contraction mapping principle iteration given in [2] or [9].

Remark 6. The problem of finding a solution x of (2) can be reduced to

finding a pair (x, L) , $x \in X$, $L \in (X)$ satisfying the system

$$M_n x^{n-1} + M_{n-1} x^{n-2} + \dots + M_2 = L \quad (10)$$

$$Lx + M_0 = 0. \quad (11)$$

The proof of the following theorem, as similar to the proof of Theorem 1, is omitted.

Theorem 2. Assume:

(a) there exists an operator $L \in L(X)$ such that L^{-1} satisfies

$$M_k ((L^{-1})^{k-1} (M_0))^{k-1} = M_k (M_0)^{k-1} (L^{-1})^{k-1}, \quad k = 2, 3, \dots, n$$

and

(b) the operator L satisfies the equation

$$L^n - L^{n-1} M_1 + (-1)^{n+1} L^{n-2} M_2 (M_0) + \dots + (-1)^2 L M_{n-1} (M_0)^{n-2} - M_n (M_0)^{n-1} = 0.$$

Then equation (2) has a solution x given by

$$x = -L^{-1}(M_0).$$

REFERENCES

1. Argyros, I.K. Quadratic equations and applications to Chandrasekhar's and related equations. Bull. Austral. Math. Soc. Vol. 32, No. 2, (1985), 275-292.
2. _____. On a contraction theorem and applications. Proc. Symp. Pure Math. Vol. 45, (1986), 1, 51-53.
3. _____. On the approximation of some nonlinear equations. Aequationes Mathematicae, Vol. 35, (1988), 29-49.
4. _____. On the solution by series of some nonlinear equations. Revista de la Academia de Ciencias de Zaragoza (to appear).

5. Gavurin, M.K. On k -ple operators in Banach spaces. Dokl. Akad. Nauk SSSR 22, No. 4, (1939), 547-551.
6. Locker, J. An existence analysis for nonlinear equations in Hilbert space. Trans. A.M.S. 13, (1967), 373-403.
7. McFarland, J.E. An iterative solution of the quadratic equation in Banach space. Proc. A.M.S. (1958), 824-830.
8. Prenter, P.M. A Weierstrass theorem for real normed spaces. Bull. A.M.S., 75, (1969), 860-862.
9. Rall, L.B. Quadratic equations in Banach spaces. Rend. Circ. Mat. Palermo, Vol. 10, (1961), 314-332.
10. _____. Solution of abstract polynomial equations by iterative methods. M.R.C. Report #892, August, (1968), 1-35.
11. _____. Nonlinear functional analysis and applications. Academic Press, New York, (1971).

VIETTA-LIKE RELATIONS IN BANACH SPACE

I.K. ARGYROS

Department of Mathematics. New Mexico State University.
Las Cruces, NM 88003.

We derive a number of results on the number of solutions of quadratic equations in Banach space.

Introduction. Consider the quadratic equation

$$x = y + B(x, x) \quad (1)$$

in a real Banach space X , where $y \in X$ is fixed and B is a bounded symmetric bilinear operator on X [1], [2], [3].

It is well known that the real quadratic equation

$$x = y + bx^2$$

has at most two solutions x_1, x_2 which satisfy the Vietta relations

$$b(x_1 + x_2) = 1$$

$$b(x_1 x_2) = y.$$

Here we study how the above results can be extended in a Banach space.

Assume if there exists a $z \in X$ such that the linear operator $B(z) : X \rightarrow X$ given by

$$B(z)(x) = B(z, x) = B(x, z) \text{ for all } x \in X$$

satisfies the condition

$$B(z) = I, \text{ where } I \text{ is the identity operator on } X$$

and

$$x_1 + x_2 = z.$$

Then if x_1 and x_2 are solutions of (1), the following are true:

$$B(x_1 + x_2) = I \quad (2)$$

$$B(x_1, x_2) = y.$$

We also derive some results on the number of solutions of (1).

Finally, an example is also provided.

Main results.

We can now prove the validity of relations (2).

Theorem 1. Let $z \in X$ be such that $B(z) = I$ and $x_1, x_2 \in X$ be solutions of (1) with

$$x_1 + x_1 = z.$$

Then

$$B(x_1 + x_1) = I$$

$$B(x_1, x_2) = y.$$

Proof. We have

$$B(x_1 + x_2) = B(z) = I.$$

Also,

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2y + B(x_1, x_1) + B(x_2, x_2) \\ &= 2y + B(x_1 + x_2, x_1 + x_2) - 2B(x_1, x_2) \\ &= 2y + x_1 + x_2 - 2B(x_1, x_2) \end{aligned}$$

$$B(x_1, x_2) = y,$$

which completes the proof of the theorem.

Theorem 2. Let $z \in X$ be such that $B(z) = I$ and let x be a solution of (1) then

$$\bar{x} = z - x$$

is a solution of (1) also.

Proof. We have

$$\begin{aligned} y + B(z - x, z - x) &= y + B(z, z) - 2B(x, z) + B(x, x) \\ &= y + z - 2x + B(x, x) \\ &= y - y + z - x \\ &= z - x \\ &= \bar{x}, \end{aligned}$$

which shows that \bar{x} is a solution of (1).

Proposition 1. Let x_1, x_2, x_3, x_4 be solutions of (1) with

$$x_1 + x_2 = z$$

$$x_3 + x_4 = \bar{z}$$

where $B(z) = B(\bar{z}) = I$. Then

$$z = \bar{z}.$$

Proof. We have

$$\begin{aligned} x_1 &= y + B(x_1, x_1) = y + B(x_3 + x_4 - x_2 + z - \bar{z}, x_3 + x_4 - x_2 + z - \bar{z}) \\ &= \dots \\ &= x_3 + x_4 + x_2 - 2B(x_2, x_3 + x_4) \\ &= x_3 + x_4 - x_2. \end{aligned}$$

(By expanding and rearranging the right hand side of the first equation.)

So, $x_1 + x_2 = x_3 + x_4$, that is

$$z = \bar{z}.$$

Proposition 2. Assume:

(a) there exist $r, s \in X$ such that

$$B(r, s) = 0 \quad (3)$$

and $x_1, x_2 \in X$ solutions of (1) satisfying (2),

(b) the following estimate is true:

$$r + x_1 = s + x_2. \quad (4)$$

Then the element $x \in X$ defined by

$$x = r + x_1$$

or

$$x = s + x_2$$

is a solution of (1).

Proof. By (3) and (4) we have,

$$\begin{aligned} B(x, x) - x + y &= B(x, x) - B(x, x_1 + x_2) + B(x_1, x_2) \\ &= B(x - x_1, x - x_2) \\ &= B(r, s) = 0, \end{aligned}$$

if $x = r + x_1$ or $x = s + x_2$.

That completes the proof of the proposition.

Applications.

Example. Let $X = \mathbb{R}^2$ and define a bilinear operator on B on X by

$$B(w, v) = \left\{ (w_1, w_1) \begin{bmatrix} b_{111} & b_{112} \\ b_{121} & b_{122} \\ b_{211} & b_{212} \\ b_{221} & b_{222} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} \right\} =$$

$$\begin{aligned}
(B(w))(v) &= \begin{bmatrix} b_{111}w_1 + b_{121}w_2 & b_{112}w_1 + b_{122}w_2 \\ b_{211}w_1 + b_{221}w_2 & b_{212}w_1 + b_{222}w_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} b_{111}w_1v_1 + b_{121}w_2v_1 & b_{112}w_1v_2 + b_{122}w_2v_2 \\ b_{211}w_1v_1 + b_{221}w_2v_1 & b_{212}w_1v_2 + b_{222}w_2v_2 \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Consider the quadratic equation on X given by

$$w = y + B(w, w)$$

$$\text{where, } y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{48} \\ -\frac{1}{48} \end{bmatrix}, \quad b_{111} = -3, \quad b_{112} = 1, \quad b_{121} = 1, \quad b_{122} = -1,$$

$$b_{211} = 1, \quad b_{212} = -1, \quad b_{221} = -1 \quad \text{and} \quad b_{222} = -1 \quad \text{or}$$

$$\begin{aligned}
w_1 &= \frac{1}{48} - 3w_1^2 + 2w_1w_2 - w_2^2 \\
w_2 &= -\frac{1}{48} + w_1^2 - 2w_1w_2 - w_2^2.
\end{aligned} \tag{5}$$

The solutions w^1, w^2, w^3, w^4 of (5) are now given by

$$w_1^1 = .0200308 \quad w_2^1 = .0200308 \quad w_1^2 = -.5200308 \quad w_2^2 = -.5200308$$

$$w_1^3 = -.25 \quad w_2^3 = .1318813 \quad w_1^4 = -.25 \quad w_2^4 = -.6318812$$

It can easily be seen that $B(z) = I$ if $z = \begin{matrix} -.5 \\ -.5 \end{matrix}$. Note that

$$w^1 + w^2 = w^3 + w^4 = z$$

$$B(w^1, w^2) = B(w^3, w^4) = y$$

and

$$B(w^1 + w^2) = B(w^3 + w^4) = I$$

REFERENCES

1. Argyros, I.K. On a contraction theorem and applications, Proc. Symp. Pure Math. Vol 45, A.M.S., (1985), 51-54
2. Rall, L.B. Quadratic equations in Banach space, Rend. Circ. Mat. Palermo, 10 (1961). 314- 332.
3. ———. Nonlinear functional analysis and applications, Acad. Press, New York, 1971.

ON THE DERIVATIVES OF HANSEN'S COEFFICIENTS IN DELAUNAY VARIABLES

R. CID Y S. FERRER

Departamento de Física Teórica (Astronomía). Facultad de Ciencias.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

Giacaglia has given a recurrence relation for the derivatives of the Hansen coefficients $X_k^{n,m}$ with respect to the eccentricity e . Using this result, we calculate the second derivative $d^2 X_k^{n,m}/de^2$ and we deduce the first and second partial derivatives of $X_k^{n,m}$ with respect to the Delaunay variables L and G . Finally, we analyse the existence of small divisors in those derivatives for small eccentricities and we calculate the zero order terms.

1 Introduction

Giacaglia has given several recurrence relations for the derivatives of the Hansen coefficients $X_k^{n,m}$ with respect to the eccentricity e , that we can resume into the formula (41) of his paper (Giacaglia, 1976, pp. 522). In this paper, using this recurrence formula, we calculate the second derivative $d^2 X_k^{n,m}/de^2$ and we deduce the first and second partial derivatives of $X_k^{n,m}$ with respect to the Delaunay variables L and G . The interest of these calculations is determined by the presence of the derivatives $\partial^n \mathcal{H}/\partial L^n$, $\partial^n \mathcal{H}/\partial G^n$ in the developments of the Lie series, when the canonical Delaunay variables (L, G, H, ℓ, g, h) are used in the theory of artificial satellite theory motion.

Moreover, we analyse the possible existence of small divisors in those derivatives for small eccentricities and we calculate the correspondent e^{-1} and e^0 order terms. This question is motivated by the study of motions around the Lagrangian point L_4 within the restricted problem (see Cid *et al.*[1]).

2 Hansen's Coefficients

The Hansen expansions are used for the development of functions of the true anomaly f , by means of the mean anomaly ℓ of an elliptic motion. In these expansions, the Hansen coefficients $X_k^{n,m}$ are defined by

$$\left(\frac{r}{a}\right)^n \exp(imf) = \sum_k X_k^{n,m} \exp(ik\ell),$$

being k, n integers and m a non negative integer.

According to Tisserand[7] the $X_k^{n,m}$ coefficients are obtained by the expressions

$$X_k^{n,m} = \frac{(-\beta)^{k-m}}{(1+\beta^2)^{n+1}} [P_{k-m} + P_{k-m+1}Q_1\beta^2 + P_{k-m+2}Q_2\beta^4 + \dots] \quad (1)$$

for $k > m$, and by

$$X_k^{n,m} = \frac{(-\beta)^{m-k}}{(1+\beta^2)^{n+1}} [Q_{m-k} + Q_{m-k+1}P_1\beta^2 + Q_{m-k+2}P_2\beta^4 + \dots] \quad (2)$$

for $m > k$, being

$$\beta = \frac{e}{1 + \sqrt{1-e^2}} = \frac{1 - \sqrt{1-e^2}}{e} \leq e, \quad e = \frac{2\beta}{1 + \beta^2}. \quad (3)$$

The values of the coefficients P_h, Q_h , for a given index h , are obtained by the relations

$$P_h = \sum_{s=0}^{s=h} (-1)^s \binom{n+1-m}{h-s} \frac{\nu_k^s}{s!}, \quad Q_h = \sum_{s=0}^{s=h} \binom{n+1+m}{h-s} \frac{\nu_k^s}{s!}, \quad (4)$$

where

$$\nu_k = \frac{ke}{2\beta} = \frac{k}{1 + \beta^2}. \quad (5)$$

Since the calculation of these coefficients is quite tedious, some authors (cfr. Hughes[5]) have given other expressions more suitable for computing tables.

In relation to the possibility of existence of small divisors in the partial derivatives of the Hansen coefficients for small eccentricities, we will use the expressions of Newcomb (1895) in the form

$$X_k^{n,m} = e^{|m-k|} [A + Be^2 + Ce^4 + \dots], \quad (6)$$

where A, B, C are numerical coefficients depending on the integers k, n and m .

3 Derivatives of the Hansen's Coefficients

In what follows when there is no confusion, we will write X instead of $X_k^{n,m}$. From any of the formulas Eq. (1) or Eq. (6), and the relations

$$\begin{aligned} L \frac{\partial e}{\partial L} &= \frac{1-e^2}{e}, & G \frac{\partial e}{\partial G} &= -\frac{1-e^2}{e}, \\ L^2 \frac{\partial^2 e}{\partial L^2} &= -\frac{(1+2e^2)(1-e^2)}{e^3}, & G^2 \frac{\partial^2 e}{\partial G^2} &= -\frac{1-e^2}{e^3}, \end{aligned}$$

we get the derivatives

$$L \frac{\partial X}{\partial L} = \frac{1-e^2}{e} \frac{dX}{de}, \quad G \frac{\partial X}{\partial G} = -\frac{1-e^2}{e} \frac{dX}{de}, \quad (7)$$

$$L^2 \frac{\partial^2 X}{\partial L^2} = -3 \frac{1-e^2}{e} \frac{dX}{de} + \frac{(1-e^2)^2}{e^2} \left[\frac{d^2 X}{de^2} - \frac{1}{e} \frac{dX}{de} \right], \quad (8)$$

$$G^2 \frac{\partial^2 X}{\partial G^2} = -\frac{1-e^2}{e} \frac{dX}{de} + \frac{(1-e^2)^2}{e^2} \left[\frac{d^2 X}{de^2} - \frac{1}{e} \frac{dX}{de} \right], \quad (9)$$

which, as we see, depends on the derivatives dX/de and d^2X/de^2 .

From the formula of Giacaglia

$$\frac{dX_k^{n,m}}{de} = \frac{2m-n}{2} X_k^{n-1,m+1} - \frac{2m+n}{2} X_k^{n-1,m-1} - \frac{me}{4(1-e^2)} [X_k^{n,m+2} - X_k^{n,m-2}] \quad (10)$$

we obtain directly

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X_k^{n,m}}{de^2} &= \frac{1}{4} [(2m-n)(2m-n+3)X_k^{n-2,m+2} \\ &\quad - 2(4m^2-n^2-n)X_k^{n-2,m} + (2m+n)(2m+n-3)X_k^{n-2,m-2}] \\ &\quad - \frac{m(1+e^2)}{4(1-e^2)^2} [X_k^{n,m+2} - X_k^{n,m-2}] \\ &\quad + \frac{e}{8(1-e^2)} [-\{2m(2m-n+3)-n\}X_k^{n-1,m+3} \\ &\quad + \{2m(2m+n+1)-n\}X_k^{n-1,m+1} \\ &\quad + \{2m(2m-n-1)-n\}X_k^{n-1,m-1} \\ &\quad - \{2m(2m+n-3)-n\}X_k^{n-1,m-3}] \\ &\quad + \frac{me^2}{16(1-e^2)^2} [(m+2)X_k^{n,m+4} - 2mX_k^{n,m} + (m-2)X_k^{n,m-4}] \end{aligned}$$

Similarly, if we consider the formula Eq. (6), we have

$$\frac{dX_k^{n,m}}{de} = e^{|m-k|} [A|m-k| + Be^2(|m-k|+2) + \dots] \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X_k^{n,m}}{de^2} &= e^{|m-k|-2} [A |m-k| (|m-k|-1) \\ &+ Be^2 (|m-k|+2)(|m-k|+1) + \dots] \end{aligned} \quad (12)$$

4 Small divisors in the derivatives of Hansen's coefficients

a) Small divisors in the first derivatives

From the formulas Eq. (7) and Eq. (11) we get easily

$$L \frac{\partial X}{\partial L} = -G \frac{\partial X}{\partial G} = (1 - e^2) e^{|m-k|-2} [A |m-k| + Be^2 (|m-k|+2) + \dots], \quad (13)$$

which shows that the derivatives $\partial X/\partial L$ and $\partial X/\partial G$ do not contain small divisors for $|m-k| = 0$ or $|m-k| \geq 2$, meanwhile they may appear when $|m-k| = 1$.

b) Small divisors in the second derivatives

From the formulas Eq. (8), Eq. (9) and Eq. (12) we see it is sufficient to examine the terms of the expression

$$\frac{1}{e^2} \left[\frac{d^2 X}{de^2} - \frac{1}{e} \frac{dX}{de} \right] = |m-k| e^{|m-k|-4} [A (|m-k|-2) + Be^2 (|m-k|+2) + \dots]. \quad (14)$$

From this we get that for $|m-k| = 0$, $|m-k| = 2$ and $|m-k| > 3$ there are no small divisors. When $|m-k| = 1$ and $|m-k| = 3$ there are small divisors.

5 Terms of the orders e^{-1} and e^0 in the first derivatives

In what follows we will refer to the derivatives $L(\partial X/\partial L)$, $G(\partial X/\partial G)$ given by the formulas Eq. (7) in which we have replace the derivative dX/de by Eq. (10) and considering $e \sim 0$. In order to do that we will have in mind the expressions of the coefficients P_i, Q_i given by Eq. (4) where we have eliminated the divisors $(1 + \beta^2)^i$, which do not affect the calculations. We will put

$$\begin{aligned} P_0 &= 1, \\ P_1 &= n+1-m-k, \\ P_2 &= \frac{1}{2}(n+1-m)(n-m) - (n+1-m)k + \frac{1}{2}k^2, \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Q_0 &= 1, \\
Q_1 &= n + 1 + m + k, \\
Q_2 &= \frac{1}{2}(n + 1 + m)(n + m) + (n + 1 + m)k + \frac{1}{2}k^2, \\
&\vdots
\end{aligned}$$

In short, we get the results from the formulas

$$\begin{aligned}
L \frac{\partial X}{\partial L} = -G \frac{\partial X}{\partial G} &= -\frac{m}{4} [X_k^{n,m+2} - X_k^{n,m-2}] \\
&\quad + \frac{1-e^2}{2e} [(2m-n)X_k^{n-1,m+1} - (2m+n)X_k^{n-1,m-1}].
\end{aligned}$$

a) *Terms of the order e^0*

a₁) $k = m$

In this case we have

$$L \frac{\partial X}{\partial L} = -G \frac{\partial X}{\partial G} = \frac{1}{2}(-4m^2 + n^2 + n) + \mathcal{O}(\beta^2).$$

a₂) $k = m + 2$

Now, we have

$$L \frac{\partial X}{\partial L} = -G \frac{\partial X}{\partial G} = \frac{1}{4}(4m^2 - 4mn + n^2 + 5m - 3n) + \mathcal{O}(\beta^2).$$

a₃) $k = m - 2$

Similarly it results

$$L \frac{\partial X}{\partial L} = -G \frac{\partial X}{\partial G} = \frac{1}{4}(-4m^2 + 4mn + n^2 - 5m - 3n) + \mathcal{O}(\beta^2).$$

b) *Terms of the order e^{-1}*

b₁) $k = m + 1$

The small divisors are of the order

$$L \frac{\partial X}{\partial L} = -G \frac{\partial X}{\partial G} = \frac{1}{2e}(2m - n) + \mathcal{O}(\beta).$$

It will not be small divisors in the case $2m = n$.

b₂) $k = m - 1$

In this case we will have

$$L \frac{\partial X}{\partial L} = -G \frac{\partial X}{\partial G} = -\frac{1}{2e}(2m + n) + \mathcal{O}(\beta).$$

It will not be small divisors in the case $2m = -n$.

6 Terms of the order e^0 in the second derivatives

In a similar manner to the previous Section, we calculate the terms of the orders e^{-3} , e^{-1} and e^0 , in the derivatives $L^2(\partial^2 X/\partial L^2)$, $G^2(\partial^2 X/\partial G^2)$ when $e \sim 0$. In order to do that, we need to have in mind the following terms

$$\begin{aligned}
 & -\frac{m}{4} [X_k^{n,m+2} - X_k^{n,m-2}] \\
 & + \frac{m}{16} [(m+2)X_k^{n,m+4} - 2mX_k^{n,m} + (m-2)X_k^{n,m-4}] \\
 & - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{4e^2}\right) [(2m-n)(2m-n+3)X_k^{n-2,m+2} \\
 & \quad - 2(4m^2 - n^2 - n)X_k^{n-2,m} + (2m+n)(2m+n-3)X_k^{n-2,m-2}] \\
 & + \frac{1}{8e} [-\{2m(2m-n+3) - n\}X_k^{n-1,m+3} \\
 & \quad + \{2m(2m+n+1) - n\}X_k^{n-1,m+1} \\
 & \quad + \{2m(2m-n-1) - n\}X_k^{n-1,m-1} \\
 & \quad - \{2m(2m+n-3) - n\}X_k^{n-1,m-3}] \\
 & + \left(-\frac{1}{2e^3} \mp \frac{1}{2e}\right) [(2m-n)X_k^{n-1,m+1} - (2m+n)X_k^{n-1,m-1}]
 \end{aligned}$$

where the signs \mp correspond to the derivatives $L^2(\partial^2 X/\partial L^2)$ and $G^2(\partial^2 X/\partial G^2)$ respectively.

a) Terms of order e^0

a₁) $k = m$

$$\begin{aligned}
 L^2 \frac{\partial^2 X}{\partial L^2} &= m^4 + \frac{1}{16}n^4 - \frac{1}{2}m^2n^2 - \frac{1}{8}n^3 - \frac{3}{4}m^2n \\
 &\quad + \frac{17}{8}m^2 - \frac{9}{16}n^2 - \frac{1}{2}mn - \frac{3}{8}n + \mathcal{O}(\beta^2),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G^2 \frac{\partial^2 X}{\partial G^2} &= m^4 + \frac{1}{16}n^4 - \frac{1}{2}m^2n^2 - \frac{1}{8}n^3 - \frac{3}{4}m^2n \\
 &\quad - \frac{15}{8}m^2 + \frac{7}{16}n^2 - \frac{1}{2}mn + \frac{5}{8}n + \mathcal{O}(\beta^2).
 \end{aligned}$$

a₂) $k = m + 2$

$$\begin{aligned}
 L^2 \frac{\partial^2 X}{\partial L^2} &= -m^4 + \frac{1}{16}n^4 + m^3n - \frac{1}{4}mn^3 - \frac{9}{4}m^3 - \frac{3}{8}n^3 + 2m^2n + \frac{5}{16}n^2m \\
 &\quad - \frac{5}{2}m^2 - \frac{9}{16}n^2 + \frac{57}{16}mn - \frac{5}{2}m + \frac{19}{8}n + \mathcal{O}(\beta^2),
 \end{aligned}$$

$$G^2 \frac{\partial^2 X}{\partial G^2} = -m^4 + \frac{1}{16}n^4 + m^3n - \frac{1}{4}mn^3 - \frac{9}{4}m^3 - \frac{3}{8}n^3 + 2m^2n + \frac{5}{16}n^2m \\ - 2m^2 - \frac{1}{16}n^2 + \frac{25}{16}mn + \frac{1}{2}m + \frac{7}{8}n + \mathcal{O}(\beta^2).$$

a₂) $k = m - 2$

$$L^2 \frac{\partial^2 X}{\partial L^2} = -m^4 + \frac{1}{16}n^4 - m^3n + \frac{1}{4}mn^3 + \frac{9}{4}m^3 - \frac{3}{8}n^3 + 2m^2n - \frac{5}{16}n^2m \\ + \frac{5}{2}m^2 + \frac{11}{16}n^2 + \frac{23}{16}mn - 5m - \frac{11}{8}n + \mathcal{O}(\beta^2),$$

$$G^2 \frac{\partial^2 X}{\partial G^2} = -m^4 + \frac{1}{16}n^4 - m^3n + \frac{1}{4}mn^3 + \frac{9}{4}m^3 - \frac{3}{8}n^3 + 2m^2n - \frac{5}{16}n^2m \\ - \frac{11}{2}m^2 - \frac{21}{16}n^2 - \frac{105}{16}mn + 7m + \frac{37}{8}n + \mathcal{O}(\beta^2).$$

7 Historic remark

Within the Restricted Problem of Three Bodies, we have studied[1] the motion in the neighbourhood of the Lagrangian point L_4 . After the short period terms are removed, we have arrived to the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = A_0(Y) + \mu [A_1(Y) \cos y + A_2(Y) \cos 2y]$$

where the coefficients A_i are functions of $X_k^{n,m}$. Giacaglia pointed out the possibility of existing of small divisors in the derivatives of A_1 and A_2 . We checked the no existence of small divisors in such case, but our research led us to a general study of the problem, which is the content of the present note.

Acknowledgements

We thank Prof. Giacaglia for his interesting observation and to Dr. Jupp for his suggesting improvements on a first draft of the paper.

Partial support for this research came from the Comisión Interministerial Científica y Técnica of Spain, Project PB87-0637.

Authors of this paper are listed in alphabetical order.

References

- [1] Cid, R., Caballero, J.A. and Ferrer, S.: *Celest. Mech.* **35**, 189-200, 1985.
- [2] Garfinkel, B.: *Astron. J.* **71**, 657-669, 1966.
- [3] Giacaglia, G. E. O.: *Celest. Mech.* **14**, 515-523, 1976.

- [4] Giacaglia, G. E. O.: Private communication, 1980.
- [5] Hughes, S.: *Celest. Mech.* **25**, 101-107, 1981.
- [6] Newcomb, S.: *Astron. Papers of the American Ephemeris* **5**, 1895.
- [7] Tisserand, F.: 1889, *Traité de Mécanique Céleste*, t. 1, Gauthier-Villars, Paris

MANIPULADORES ALGEBRAICOS EN MECANICA CELESTE

A. ABAD Y M. SEIN-ECHALUCE

Grupo de Mecánica Espacial. Facultad de Ciencias Matemáticas.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

The appearance of new techniques involving the use of electronic computers has been propitious for a fast development in the different subjects of the Science. In this paper, the importance of the algebraic manipulators in Celestial Mechanics is made evident and the basic points which one should bear in mind to build the best calculation tool for solving its problems: Poisson series processors, are presented.

1.-INTRODUCCION

Durante tres siglos la Mecánica Celeste constituyó un enorme campo de trabajo para matemáticos y astrónomos alcanzando su momento cumbre con el descubrimiento del planeta Neptuno por Adams y Le Verrier mediante un método analítico no observacional.

Delaunay pasó veinticinco años de su vida intentando hallar la solución completa al *main problem* en la teoría lunar. La resolución del mismo problema llevó a Brown quince años, a los que añadió diez años más dedicados al estudio de los efectos debidos a los planetas y siete ordenando sus fórmulas para que los empleados de las oficinas de almanaques pudiesen calcular una posición de la Luna cada cuatro horas.

Hacia mediados del siglo veinte se había paralizado casi por completo cualquier actividad en este campo en la mayoría de las comunidades científicas, fruto de las divergencias surgidas entre observación y cálculo, y de la magnitud de los cálculos involucrados.

Solo en unos pocos lugares sobrevivió, entre ellos en la Universidad de Louvain en Bélgica donde Monseigneur G. Lemaître, al mismo tiempo que conseguía importantes logros en Astronomía hizo grandes esfuerzos para aplicar los progresos de la tecnología de computación a sus trabajos. Lemaître trasladó sus cálculos de las tablas de logaritmos a máquinas calculadoras manuales, después a máquinas eléctricas y más tarde a máquinas calculadoras automatizadas mecánicamente. Además, supo transmitir a sus discípulos la idea de que el futuro de la Mecánica Celeste pertenece a

una nueva raza de astrónomos matemáticos: hombres con una formación sólida en análisis puro, artistas en programación de ordenadores, expertos en análisis numérico y siempre dispuestos a descubrir como el progreso en la tecnología hardware puede ayudar a resolver el siguiente reto.

Aparte del papel tradicional de los ordenadores como veloces máquinas de cálculo, su uso ha permitido automatizar paso a paso diversos procesos algebraicos involucrados en muchas Ciencias. Así, uno de los seguidores de Lemaître, A. Deprit afrontó la tarea de hallar la solución analítica del main problem en la teoría lunar. Los resultados obtenidos dieron una precisión de 50 cm, frente a los 300 km de error en los resultados de Delaunay y los 3 km en los de Brown (Deprit et al, 1971). En 18 meses se completaron los resultados que a Delaunay llevaron 25 años y únicamente se encontró un error. Además de producir los movimientos medios y las expresiones analíticas completas para la longitud, latitud y paralaje de la Luna, se añadieron las derivadas parciales con respecto a las constantes de la teoría.

Más tarde y junto a A. Rom y J.M.A. Danby, A. Deprit desarrolló un paquete de subrutinas FORTRAN para manipular automáticamente series de Fourier múltiples cuyos coeficientes son series de Laurent multivariadas, a las que llamó *Series de Poisson*, y que en la actualidad constituyen una de las principales herramientas de la Mecánica Celeste (Deprit et al, 1965). A partir del paquete original MAO (Mechanized Algebraic Operations), muchos han hecho modificaciones de acuerdo con sus necesidades particulares (Broucke, 1969; Rom, 1970; Dasenbrock, 1982).

Cada avance realizado en el desarrollo del MAO marca un progreso en la automatización de los desarrollos asintóticos en Mecánica Celeste y en dinámica no lineal.

La automatización de los procesos ha servido a lo largo de la historia para rebatir o corroborar teorías construidas en el pasado y en este último caso tratar de mejorarlas. Esto es lo que ocurrió con un procedimiento que Poincaré desarrolló con el fin de construir transformaciones canónicas que normalizaran sistemas Hamiltonianos a partir de un algoritmo inventado por Lindstedt para generar soluciones periódicas de ecuaciones diferenciales no lineales. La automatización de este proceso condujo a A. Deprit a una reformulación del método para obtener la transformación canónica inmediatamente en su forma explícita utilizando las transformaciones de Lie. El rasgo más característico de un algoritmo de perturbaciones basado en la transformación de Lie (Deprit, 1969) es que las operaciones se pueden realizar naturalmente de una forma recursiva, lo que convierte el problema en una simple traducción a un programa de ordenador. A partir de entonces reconstruyó sus trabajos basándose en las transformaciones de Lie.

Además de los avances que en tecnología de ordenador se estaban produciendo, otro de los motivos que ayudaron al resurgir de la Mecánica Celeste fué el problema de los satélites artificiales. Su lanzamiento y puesta en órbita planteaba numerosas cuestiones a resolver que precisaban de la aplicación de nuevas técnicas analíticas y computacionales para lograr mayor precisión y rapidez en los cálculos. Así pues, considerando la solución de Aksnes para el main problem en la teoría del satélite artificial, la técnica de la *eliminación de la paralaje* (Deprit, 1981b), ejecutada por ordenador, abrevia los desarrollos convencionales de Brouwer y Kōzai en un 87% (Coffey y Deprit, 1980).

Con todo esto, hacia los años setenta la Mecánica Celeste se encontraba mucho más viva que antes y así continua en la actualidad, debido, por una parte, al crecimiento masivo de cuestiones que la era espacial plantea y por otra a las nuevas técnicas de programación (manipulación algebraica, sistemas interactivos,...) y los nuevos ordenadores (ordenadores LISP, array processors, etc.) que posibilitan la realización de cálculos más complejos, a mayor velocidad y la construcción de teorías más precisas (Brumberg, 1988, Deprit, 1981 Richardson, 1988).

2.- MANIPULADORES ALGEBRAICOS EN MECANICA CELESTE

Los programas de manipulación algebraica constituyen la base del moderno desarrollo de la Mecánica Celeste.

Dos vías han incidido en esta progresión. Por un lado, programas de manipulación algebraica de tipo general como pueden ser MACSYMA o REDUCE para grandes ordenadores y MUMATH para microordenadores. Por otro lado, programas específicos contruidos para resolver problemas concretos. Este segundo camino, aunque queda limitado por el tipo de problema a resolver, posee ventajas con respecto al anterior, pues estos programas son mucho más rápidos, con lo cual pueden llegar, en el mismo tiempo de cálculo, a órdenes mucho más elevados de la teoría. Por otra parte, aprovechan de forma más eficiente la capacidad de almacenamiento de la máquina, lo que permite su utilización en pequeños ordenadores.

Para hacernos idea de como debe ser un procesador específico aplicado a problemas de Mecánica Celeste, repasemos rápidamente algunos de los problemas que ésta trata.

Problema de dos cuerpos:

Este problema, básico en la Mecánica Celeste, viene definido por las conocidas ecuaciones del movimiento

$$\frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -m \frac{\vec{r}}{r^3}$$

La integración de estas ecuaciones determina un movimiento plano que permite expresar la ecuación de la trayectoria en coordenadas polares $r=r(f)$, donde f es la anomalía verdadera. Sin embargo, no es posible expresar la ecuación de la trayectoria explícitamente en función del tiempo sin efectuar desarrollos en serie. Para esto, hay que tener en cuenta que

$$\vec{r} = r \cos f \vec{p} + r \sin f \vec{q}$$

donde \vec{p} y \vec{q} son vectores que dependen de los elementos orbitales. Por otro lado, $r \cos f$ y $r \sin f$ se obtendrán a partir de las fórmulas de Hansen

$$\left(\frac{r}{a}\right)^m \begin{Bmatrix} \sin \\ \cos \end{Bmatrix} (mf) = \sum_{p \geq 1} X_p^{mn}(e) \begin{Bmatrix} \sin \\ \cos \end{Bmatrix} (pM)$$

siendo $M=n(t-T)$

Perturbaciones al problema de dos cuerpos:

En los casos en los que existen perturbaciones, las ecuaciones del movimiento que es necesario integrar son de la forma

$$\frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -m \frac{\vec{r}}{r^3} + \vec{\phi}$$

donde $\vec{\phi}$ es la función de perturbación que dependerá de cada problema concreto.

En cualquier caso, equivale a resolver un sistema dinámico de Hamiltoniano H expresado en las coordenadas canónicas (p, q) y que viene dado por las ecuaciones

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

$$\frac{dq}{dt} = +\frac{\partial H}{\partial p}$$

donde $H=T+V$, T es la energía cinética y V es el potencial que depende de la perturbación.

En el caso del satélite artificial, el potencial V es de la forma

$$V = -\frac{m}{r} \left[1 + \sum_{n \geq 1} \left(\frac{a}{r} \right)^n \{ J_n P_n(\text{senf}) + \sum J_n^m P_n^m(\text{senf}) \cos(m(\lambda - \lambda_n^m)) \} \right]$$

donde P_n y P_n^m son los polinomios de Legendre y J_n y J_n^m los armónicos zonales y tesserales respectivamente, .

Tanto en la teoría del satélite artificial, como en la mayoría de los problemas clásicos de la Mecánica Celeste (perturbaciones producidas por un tercer cuerpo, movimiento del sólido, etc.), el potencial perturbado presenta una expresión formal similar a la del satélite, esto es, puede expresarse como un desarrollo en serie de Poisson

$$\sum C \begin{matrix} i_1 i_2 \dots i_k \\ j_1 j_2 \dots j_n \end{matrix} x_1^{i_1} \dots x_k^{i_k} \begin{Bmatrix} \text{sen} \\ \text{cos} \end{Bmatrix} (j_1 y_1 + \dots j_n y_n)$$

Esto hace de este tipo de series la herramienta fundamental en la resolución analítica de estos problemas.

Afortunadamente, el tratamiento automático de las series de Poisson es posible gracias a sus propiedades, que aseguran que la suma, diferencia, y producto de dos series de Poisson, así como su derivada parcial e integral con respecto a una variable son también series de Poisson.

3.-PROCESADORES DE SERIES DE POISSON

Si abordamos el problema de la construcción de un paquete específico de programas que permitan una automatización, lo más amplia posible, de la Mecánica Celeste, debemos dividir el trabajo en tres partes.

En primer lugar, como se ha visto en el apartado anterior, la herramienta básica que utiliza la Mecánica Celeste son las series de Poisson. Esto nos lleva a pensar en la construcción de un *Procesador de series de Poisson (PSP)* que nos permita manipular dichas series y efectuar con ellas todo tipo de operaciones algebraicas posibles. Este procesador constituirá la base fundamental del paquete de programas.

Un segundo paso lo constituirá la resolución algebraica del problema fundamental, es decir, el problema de dos cuerpos. El conjunto de rutinas que lo resuelven, que llamaremos *Procesador Kepleriano*, será construido utilizando el PSP y permitirá la obtención automática de los desarrollos literales más usuales en Mecánica Celeste, como son entre otros $E=E(M)$, $f=f(M)$, fórmulas de Hansen, $\vec{r}=\vec{r}(M)$, etc. (Broucke, 1970).

Por último, deben desarrollarse los algoritmos adecuados para la resolución de otros problemas, en particular, deben construirse, a partir de los PSP, programas que apliquen la *Teoría de Perturbaciones* a problemas concretos, lo cual permitirá la resolución analítica de los mismos.

Centrándonos en la construcción de un PSP debemos considerar cuatro aspectos del mismo.

1.-Tipos de operaciones a realizar con las series:

Inicialmente deben ser implementados algoritmos que permitan obtener la suma (o combinación lineal) y el producto de series, así como las derivadas e integrales de las series con respecto a alguna de sus variables, tanto polinómicas como angulares.

Al desarrollar estos algoritmos es preciso tener en cuenta las peculiaridades de cada una de las operaciones. Por ejemplo, en lo que respecta al producto hay que considerar que es una de las operaciones que más tiempo de ordenador consume, por ello, es preciso la búsqueda de algoritmos cada vez más rápidos (Fateman, 1974).

A estas operaciones básicas será preciso añadir otras, que aunque menos usadas sean de utilidad en determinados problemas.

Por ejemplo, si pensamos en el desarrollo de una función tal como $\sin(\theta + \epsilon)$ en potencias de ϵ , tendremos

$$\begin{aligned}\sin(\theta + \epsilon) &= \cos \epsilon \sin \theta + \sin \epsilon \cos \theta \\ &= \left(1 - \frac{\epsilon^2}{2!} + \frac{\epsilon^4}{4!} - \dots\right) \sin \theta + \left(\epsilon - \frac{\epsilon^3}{3!} + \frac{\epsilon^5}{5!} - \dots\right) \cos \theta\end{aligned}$$

Este tipo de desarrollo puede ser resuelto implementando una función que efectúe un desarrollo de Taylor

$$f(x+\Delta x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\partial^k f(x)}{\partial x^k} \frac{(\Delta x)^k}{k!}$$

Este mismo desarrollo de Taylor puede ser también de utilidad en otro problema como es la resolución iterativa de la ecuación de Kepler

$$E = M + e \sin M$$

$$E_0 = M$$

$$E_1 = E + e \sin E_0 = M + e \sin M$$

$$E_2 = E + e \sin E_1 = M + e \sin (M + e \sin M)$$

donde aplicando el desarrollo de Taylor anterior con $\epsilon = e \sin M$, se tiene

$$E_2 = M + e \sin M + \frac{e^2}{2} \sin 2M + \dots$$

2.-Limitación en el orden de los resultados:

Los programas de manipulación de series de Poisson suelen ser en general lentos debido al gran número de operaciones que deben realizar. Por ello es preciso minimizar al máximo este número para conseguir algoritmos eficientes.

Un elemento fundamental en esta optimización de los algoritmos es el truncado de las series en un orden determinado, lo que permite prescindir, en el momento de realizar alguna operación, de determinados términos de la serie que cumplan alguna condición específica. Esto se hace particularmente importante a la hora de ejecutar el producto de dos series.

Varios criterios de truncado pueden considerarse en un PSP.

Ninguno.- Esto resulta muy sencillo de implementar pero produce programas excesivamente lentos, con muchos más cálculos de los necesarios y un espacio de almacenamiento en memoria muy grande.

Automático.- Truncando siempre en un orden prefijado. Este procedimiento resulta poco flexible, aunque fácil de implementar.

A elección.- Trunca variando algún parámetro del programa en cualquier punto de éste y con los siguientes criterios posibles:

- * En una variable polinómica.
- * En el conjunto de todas las variables (Comparando los órdenes de cada una)
- * En un múltiplo de la variable angular.
- * Para determinados valores de los coeficientes.

Aunque éste resulta el procedimiento más difícil de implementar, es el óptimo en cuanto a tiempo de ejecución y capacidad de almacenamiento.

3.-Entrada y salida:

La primera operación a realizar es la definición de una serie introduciendo sus coeficientes y exponentes de manera que éstos sean posteriormente empaquetados de acuerdo con los criterios de almacenamiento. Asimismo debemos poder leer y escribir las series en ficheros que permitan su utilización en otros programas.

Puede ser importante el formato con que se presenten los resultados de los cálculos. Este formato puede ser meramente descriptivo de la serie, o bien, compatible con algún lenguaje de programación, como FORTRAN, lo que permite su utilización en otros programas de cálculo basados en los resultados analíticos del PSP.

4.-Almacenamiento de las series en el ordenador:

El almacenamiento de las series es el problema fundamental de la construcción de un PSP, pues de éste dependen la velocidad del mismo, la cantidad de memoria central necesaria y la complejidad de los algoritmos de tratamiento de las series.

Existen diversas soluciones entre las que destacaremos las dadas por Broucke (1969) y por Dasenbrock (1982).

Recordemos que una serie se puede expresar como

$$\sum C_{j_1 j_2 \dots j_n}^{i_1 i_2 \dots i_k} x_1^{i_1} \dots x_k^{i_k} \begin{Bmatrix} \text{sen} \\ \text{cos} \end{Bmatrix} (j_1 y_1 + \dots j_n y_n)$$

por lo cual, cada término vendrá definido por

a) Un coeficiente $C_{j_1 j_2 \dots j_n}^{i_1 i_2 \dots i_k}$ que deberá ser un número entero, racional o real (punto flotante) con la precisión deseada.

b) Los exponentes polinómicos i_1, i_2, \dots, i_k y los coeficientes de las variables angulares j_1, j_2, \dots, j_n que suelen tomarse siempre como enteros.

c) Un indicador cuyo valor sea -1, o 1 según se trate de un seno o un coseno.

Los coeficientes suelen definirse como un número racional, por lo que son suficientes dos variables enteras para su almacenamiento.

Los índices $i_1, i_2, \dots, i_k, j_1, j_2, \dots, j_n$ suelen venir empaquetados utilizando la aritmética binaria, pues en una palabra de 32 bits se pueden almacenar hasta cuatro valores enteros comprendidos entre $-64 \leq i \leq 63$. De esta forma, una variable entera puede contener cuatro de los índices anteriores, construyendo las correspondientes rutinas de empaquetado y desempaquetado. La acotación de los índices dentro del intervalo $[-64, 63]$ es suficiente en la mayor parte de los casos.

Normalmente en el desarrollo de un problema aparecen gran número de series y con ellas un número mucho mayor de términos a almacenar y manejar. En función de esto, será necesario fijar unos límites al número de variables polinómicas y angulares a manejar de manera que quede perfectamente prefijada la cantidad de memoria necesaria para almacenar cada término de una serie.

Los procesadores construidos por Broucke y Dasenbrock están ambos escritos en FORTRAN por ser éste el lenguaje más usado por la comunidad científica, sin embargo, este lenguaje no se adapta bien a este tipo de procesos, por lo que aparecen una serie de limitaciones que serán consideradas mas adelante.

En ambos casos, cada término de una serie está constituido por un conjunto de variables enteras que representan el coeficiente, los exponentes polinómicos y argumentos angulares empaquetados y el indicador de seno-coseno. Nosotros por abreviar, supondremos que este término está almacenado en una única variable dimensionada que llamaremos TERMSERIE. La dimensión máxima de esta

variable deberá coincidir con el número máximo MAXT de términos de serie que se tenga previsto en función del tipo de problemas a resolver y la capacidad del ordenador.

Es preciso también definir una zona de almacenamiento común mediante un COMMON que contenga las variables TERMSERIE para que todas las series sean accesibles desde cualquier rutina.

El procesador de Broucke, que tiene como precedente los de Deprit et al (1965) y Rom(1970), utiliza un almacenamiento de las series en *pilas*, de manera que si una serie comienza con un término almacenado en TERMSERIE(2001), el siguiente estará en TERMSERIE(2002) y así sucesivamente. Los términos son almacenados en forma secuencial. Para este tipo de almacenamiento será preciso dimensionar una variable entera SERIE(2,MAXS), donde MAXS será un número que represente el número máximo de series que podrá manejar el ordenador, de manera que SERIE(1,10) represente el índice de la variable TERMSERIE donde está almacenado el primer término de la serie 10 y SERIE(2,10) el número de términos de la serie. Las series son definidas mediante un número entero comprendido entre 1 y MAXS.

SERIE(i,j)	i=1	i=2
j=1		
j=10	2001	15
j=MAXS		

i	TERMSERIE(i)
1	
2	
2001	SERIE 10
2015	
3501	Espacio libre
MAXT	

En este sistema se van ocupando en orden todos los elementos de la variable dimensionada TERMSERIE y el espacio no ocupado se agrupa en las últimas posiciones de TERMSERIE. Es preciso, por tanto, definir otra variable entera que represente el índice del primer elemento de TERMSERIE no ocupado por ninguna serie. En el caso de la figura será el 3501.

Esta forma de almacenamiento es muy fácil de implementar pero tiene graves problemas si se considera el tiempo de ejecución, pues cada vez que se borra una serie o se añade algún término hay que reordenar toda la zona de almacenamiento.

Dasenbrock(1982), construye su PSP incorporando a las series el concepto de *lista* en lugar de almacenarlo en pilas.

Como se sabe, una lista puede incorporarse al ordenador a partir de dos elementos, uno que define el correspondiente elemento de la lista y que ocupa una determinada posición en la memoria del ordenador, y otro elemento llamado puntero que señala la posición del siguiente elemento de la lista.

FORTRAN no tiene previsto el manejo de variables puntero que indican las direcciones de memoria de cada variable, como ocurre en PASCAL o C, así pues, es preciso la definición de los punteros de forma artificial. Para ello, se define una nueva variable entera SIGUIENTE(i) dimensionada de 1 a MAXT.

De esta forma, si definimos la serie 10, el primer término de ésta ocupará la posición SERIE(1,10) de la variable TERMSERIE. SERIE(2,10) ya no representa el número de términos de la serie, sino la posición del último término dentro de TERMSERIE. Si, por ejemplo SERIE(1,10)=2001, entonces el primer término de la serie estará almacenado en TERMSERIE(2001), el siguiente término no estará en TERMSERIE(2002) como ocurriría en el procesador de Broucke, sino en la posición definida por SIGUIENTE(2001). Si SIGUIENTE(2001)=5, entonces, el segundo término de la serie estará en TERMSERIE(5). El siguiente término estará en SIGUIENTE(5), etc. La serie acaba en el término definido por SERIE(2,10).

SERIE(i,j)	i=1	i=2	i	TERMSERIE(i)	SIGUIENTE(i)
j=1			1		
			5		3415
j=10	2001	3415	2001		5
			3415		0
j=MAXS			MAXT		

Aunque este proceso es más costoso de implementar da unos resultados mucho mejores, pues no es preciso reordenar todo el espacio de almacenamiento cada vez que se modifique una serie, basta con cambiar el valor de la variable SIGUIENTE.

4.- FUTURO DE LOS PSP

La mayor parte de los PSP contruidos hasta ahora, lo han sido en FORTRAN, sin embargo, aparecen muchas limitaciones al utilizar este lenguaje, pues es muy poco flexible para este tipo de problemas.

En primer lugar, la estructura de listas, que es la más adecuada para la definición de las series de Poisson, puede ser tratada mucho mejor utilizando lenguajes que manejen punteros, como PASCAL o C, o bien lenguajes específicamente diseñados para este tipo de estructuras como LISP.

Actualmente hay construido (Miller, 1988) un programa de este tipo en LISP, sin embargo, la necesidad de grandes ordenadores para la utilización de LISP y su gran dificultad y especialización, hacen aconsejable una solución intermedia que permita al utilización de los PSP en ordenadores más pequeños, incluyendo microordenadores. En este sentido, miembros del Grupo de Mecánica Espacial de la Universidad de Zaragoza, venimos trabajando desde hace algún tiempo en la construcción de un nuevo PSP escrito en lenguaje C que permitirá, aparte de un mejor tratamiento de la estructura de las series mediante listas, resolver algunos de los problemas que actualmente aparecen en estos procesadores como son entre otros:

- * Tratamiento de los coeficientes, cuando el numerador o denominador del número racional correspondiente exceda de la capacidad de almacenamiento de un entero.
- * Posibilidad de tratamiento de exponentes polinómicos y coeficientes angulares como números racionales o reales (punto flotante).

Por otro lado, se está intentando implementar, junto con estos PSP, algoritmos que resuelvan problemas analíticos de la Mecánica Celeste y que no lleven necesariamente asociadas Series de Poisson, o bien, que exijan un tratamiento diferente como por ejemplo: el manejo de funciones elípticas que aparecen en gran número de modernos problemas de Mecánica Celeste, y por otro lado el tratamiento de pequeños divisores.

Asociado a los PSP y como una extensión más de éstos, surge la construcción de paquetes de *Generación Automática de Programas de Efemérides*, en la línea del METAPROGRAM de Coffey y Alfriend(1984) para la teoría del satélite artificial. Esto permite la elección de una determinada teoría en forma interactiva y, mediante un PSP, en este caso el de Dasenbrock, genera una teoría analítica. La salida de este programa es otro programa FORTRAN que calcula las efemérides del satélite artificial. Con esta herramienta resultará mucho más sencilla una comparación de distintas teorías analíticas.

AGRADECIMIENTOS

Damos las gracias al Dr. A. Deprit del National Institute of Standards and Technology que nos introdujo en el tema de los manipuladores algebraicos y al Dr. R. Dasenbrock del Naval Research Laboratory que puso a nuestra disposición su Procesador de Series de Poisson.

Este trabajo ha sido parcialmente subvencionado por CICYT Proy. nº PB87-0637 y CAZAR (1988).

REFERENCIAS

- Broucke, R. and Garthwaite, K.: 1969, *A programing system for analytical series expansions on a computer*. Celes. Mech 1, pp 271-284.
- Broucke, R.: 1970, *How to Assemble a Keplerian Processor*. Celes. Mech 2 pp 9-20.

- Broucke, R.A. et al.:1982 , *Application of Automated Algebraic Manipulation to Canonical Perturbation Problems*. AFCET Conference on Numerical Math., Paris March 1982.
- Brumberg V. A. et al.: 1988, *Specialized Celestial Mechanics Systems for Symbolic Manipulation*. Proceedings of the IAU Colloquium 109. Gaithersburg.
- Coffey, S.L. and Deprit, A.: 1980, *Short Period Elimination in Satellite Theory*. *Journal of Guidance and Control*. AIAA, 80-1657.
- Coffey, S.L. and Alfried, K.T.: 1984, *An Analytic Orbit Prediction Program Generator*. *Journal of Guidance Control* Vol. 7, No. 5, pp 575-581.
- Dasenbrock, R.R.:1982, *A FORTRAN-Based Program for Computerized Algebraic Manipulation*. NRL Report 8611.
- Deprit, A., Danby, J.M.A. and Rom, A.: 1965, *The symbolics manipulations of Poisson Series*. Boeing Scientific Research Laboratories D1-82-0481.
- Deprit, A.:1969, *Canonical Transformation Depending on a Small Parameter*. *Celes. Mech* 1, pp 12-30.
- Deprit, A, Henrard, J. and Rom, A. : 1971, *Analitical Lunar Ephemeris: Delaunay's Theory*. *Astron. Journal* Vol 76, pp 269-272.
- Deprit, A.:1981, *Celestial Mechanics: Never Say No To a Computer*. *Journal of Guidance and Control* Vol 4 No. 6, 577
- Deprit, A. :1981b, *The Elimination of the Parallax*. *Celes. Mech.* 24,pp 111-154.
- Fateman, R.J. : 1974, *On the multiplication of Poisson Series*. *Celes. Mech* 10, pp 243-247.
- Jefferys, W.H.: 1970, *A FORTRAN-Based List Procesor for Poisson Series*. *Celes. Mech.* 2, pp 467-473.
- Jefferys, W.H.: 1972, *A Precompiler for the Formula Manipulation System TRIGMAN*. *Celes Mech* 6, pp 117-124.
- Miller, B.R.: 1988 , *MAO Version 2.0* Comunicación Privada.
- Richardson, D. L.: 1988, *PARSEC: An Interactive Poisson Series Processor for Personal Computing Systems*. Proceedings of the IAU Colloquium 109. Gaithersburg.
- Rom, A.: 1970, *Mechanized Algebraic Operations (MAO)*. *Celes. Mech* 1, pp 301-319.
- Rom, A.: 1971, *Echeloned Series Processor (ESP)*. *Celes. Mech* 3, pp 331-343.

ESTABILIDAD ORBITAL DE METODOS LINEALES MULTIPASO DE TIPO COWELL

J.M. FRANCO Y M. PALACIOS

Departamento de Matemática Aplicada (E.T.S.I.I.).

Universidad de Zaragoza. 50015 ZARAGOZA (España).

A class of linear multistep methods for the special second order IVP $y'' = f(t, y)$, connecting the property of symmetry with a property of periodicity was studied by Lambert and Watson[6]. Frequently the problems of orbital mechanics incorporate the first derivative explicitly; in order to integrate such problems, Franco-Palacios [1] have proposed methods of Cowell-type. Using the ideas above mentioned we determine a set of linear multistep methods of Cowell-type for second order IVP which possess the property of periodicity and we generalize the results obtained by Lambert and Watson. This set of orbitally stable methods is illustrated by integrating two problems whose solutions are of periodic character.

1. INTRODUCCION

Las ecuaciones del movimiento de los problemas de la Mecánica Orbital pueden escribirse, en formulación de Cowell, como un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden de la forma

$$y''(t) = f(t, y(t), y'(t)) \quad (1.1)$$

Las ecuaciones diferenciales en las que no aparece la primera derivada de la solución, es decir $y'' = f(t, y)$, pueden ser integradas mediante los clásicos métodos de Störmer-Cowell (Henrici[4]). Tales métodos, en la terminología de Stiefel and Bettis[9], sufren una deficiencia numérica conocida con el nombre de *inestabilidad orbital*, es decir, cuando se computan órbitas circulares ocurre que la solución numérica que se obtiene espirala hacia el interior de la circunferencia a lo largo del tiempo. Para evitar esta deficiencia, Stiefel and Bettis[9] proponen métodos de tipo Störmer-Cowell modificados que precisan un conocimiento a priori de la frecuencia principal del problema. Alternativamente, Lambert and Watson[6] estudian métodos multipaso para el problema especial de segundo orden tales que tengan ciertas propiedades de periodicidad. Cuando se computan orbitas circulares, la solución numérica proporcionada por los métodos de Lambert and Watson[6] describe una órbita circular

aproximada con un error en la fase de la órbita.

Un problema interesante como es el del movimiento de un satélite artificial terrestre en el que se tenga en cuenta el efecto del rozamiento atmosférico nos lleva inmediatamente a un sistema de ecuaciones caracterizado por (1.1). Moore[7] estudia la integración numérica del problema (1.1) reduciéndolo a un sistema doble de primer orden y generaliza los resultados de Lambert and Watson[6] para métodos multipaso que integren problemas de valor inicial de primer orden.

En este trabajo, los autores proponen la integración del problema (1.1) mediante métodos numéricos de integración directa de tipo Cowell que posean ciertas propiedades de periodicidad de forma que generalicen los métodos propuestos por Lambert and Watson[6].

2. METODOS TIPO COWELL: INTERVALO DE PERIODICIDAD

Consideraremos la familia de métodos lineales multipaso de tipo Cowell

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j^{(2)} y_{n+j} = h^2 \sum_{j=0}^k \beta_j^{(2)} f(t_{n+j}, y_{n+j}, y'_{n+j}) \quad (2.1a)$$

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j^{(1)} y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j^{(1)} f(t_{n+j}, y_{n+j}, y'_{n+j}) \quad (2.1b)$$

para la integración numérica del problema de valor inicial de segundo orden $y'' = f(t, y, y')$, $y(t_0) = y_0$, $y'(t_0) = y'_0$, definida sobre una red regular de puntos ($t_n = nh$, $n = 0, 1, 2, \dots$), y caracterizada por los polinomios

$$\rho^{(i)}(\zeta) = \sum_{j=0}^k \alpha_j^{(i)} \zeta^j \quad \text{y} \quad \sigma^{(i)}(\zeta) = \sum_{j=0}^k \beta_j^{(i)} \zeta^j, \quad i = 1, 2, \quad \zeta \in \mathbb{C}$$

Denotamos tal familia mediante $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$. Además, supondremos que se verifican las siguientes hipótesis:

$$H1) |\alpha_0^{(i)}| + |\beta_0^{(i)}| > 0, \quad \alpha_k^{(i)} > 0, \quad i = 1, 2$$

$$H2) \rho^{(i)}(\zeta) \text{ y } \sigma^{(i)}(\zeta) \text{ no tienen factores comunes, } i = 1, 2$$

$$H3) \text{ El método } \{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\} \text{ es consistente, es decir, } \rho^{(2)}(1) = \rho^{(2)'}(1) = 0, \\ \rho^{(2)''}(1) = 2 \sigma^{(2)}(1) \text{ y } \rho^{(1)}(1) = 0, \rho^{(1)'}(1) = \sigma^{(1)}(1)$$

$$H4) \text{ El método } \{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\} \text{ verifica que las raíces de } \rho^{(i)}(\zeta) \text{ están en el}$$

círculo unidad y las raíces de módulo unidad tienen como mucho multiplicidad i.

(Hacemos notar que $H3 + H4 \Rightarrow$ convergencia de $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$)

Consideremos el problema test escalar $y'' + \lambda^2 y = 0$, $\lambda \in \mathbb{R}$, cuya solución general $y(t) = A \cos \lambda t + B \sin \lambda t$ es periódica con periodo $2\pi/\lambda$, para cualesquiera condiciones iniciales sobre y y y' no triviales. Aplicando un método $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ a esta ecuación test, sin más que particularizar en la expresión del polinomio de estabilidad dada por Franco y Palacios[2], obtenemos para el problema test considerado el siguiente polinomio de estabilidad

$$\Pi(\zeta, z^2) = \rho^{(1)}(\zeta) [\rho^{(2)}(\zeta) + z^2 \sigma^{(2)}(\zeta)] , \quad z = \lambda h \in \mathbb{R} \quad (2.2)$$

cuyas raíces $\{\zeta_j, j = 1, 2, \dots, 2k\}$ determinan la naturaleza de la solución numérica

$$y_n = \sum_{j=1}^{2k} A_j \zeta_j^n \quad (2.3)$$

de la correspondiente ecuación en diferencias.

Siguiendo las ideas de Lambert and Watson[6], introducimos el concepto fundamental de estabilidad orbital para métodos de tipo Cowell.

2.1-Definición: El método $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ se dice que tiene un *intervalo de periodicidad* $(0, z_0^2)$ si para todo $z^2 \in (0, z_0^2)$, las raíces ζ_j del polinomio de estabilidad (2.2) verifican

$$\zeta_1 = e^{i\theta(z)} , \quad \zeta_2 = e^{-i\theta(z)} , \quad |\zeta_j| = 1 , \quad j = 3, 4, \dots, 2k \quad (2.4)$$

donde $\theta(z) \in \mathbb{R}$ y ζ_1, ζ_2 se reducen a la raíz principal doble $\zeta = 1$ del polinomio $\rho^{(2)}(\zeta)$, cuando z tiende a cero.

La relevancia de la noción de intervalo de periodicidad viene expresada en el siguiente resultado, cuya demostración es similar a la dada por Lambert & Watson [6].

2.2-Teorema: Sea el P.V.I. (problema test) $y'' + \lambda^2 y = 0$, $y(0) = y_0$, $y'(0) = y'_0$, cuya solución analítica es $y(t) = C_1 e^{i\lambda t} + C_2 e^{-i\lambda t}$. Apliquemosle el método $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ de orden p con un paso h no nulo y tal que $z^2 = (\lambda h)^2$ pertenece al intervalo de periodicidad del método que suponemos no vacío. Supongamos, además, que los valores de iniciación del método son también de orden p , es decir: $y_n^{(i)} = y^{(i)}(t_n) + O(h^{p+2-i})$, $n = 0, 1, \dots, k-1$. Entonces:

i) Las raíces ζ_1, ζ_2 vienen dadas por (2.4), donde

$$\theta(z) = z + O(z^{p+1}) \quad (2.5)$$

ii) Los coeficientes A_j de la solución numérica (2.3) satisfacen las relaciones

$$A_1 = C_1 + O(z^{p+1}), \quad A_2 = C_2 + O(z^{p+1}), \quad A_j = O(z^{p+1}), \quad j = 3, 4, \dots, 2k \quad (2.6)$$

Demostración: Tomando la función test $g(t) = e^{i\lambda t}$, llevándola a la expresión (2.2) y dividiendo por $e^{i\lambda x}$, obtenemos teniendo en cuenta que el método es de orden $p > 0$, que

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j^{(1)} e^{i(jz)} \left(\sum_{j=0}^k (\alpha_j^{(2)} + z^2 \beta_j^{(2)}) e^{i(jz)} \right) = 0(z^{p+3}), \quad z = h\lambda$$

o, equivalentemente

$$\Pi(e^{iz}, z^2) = 0(z^{p+3}), \quad z = \lambda h$$

Sin embargo, el polinomio de estabilidad (2.2) se puede expresar como

$$\Pi(\zeta, z^2) = \alpha_k^{(1)} (\alpha_k^{(2)} + z^2 \beta_k^{(2)}) \prod_{j=1}^{2k} (\zeta - \zeta_j)$$

Si $z^2 \in (0, z_0^2)$, entonces $\zeta_1 = e^{i\theta(z)}$, $\zeta_2 = e^{-i\theta(z)}$ y, por lo tanto,

$$(e^{iz} - \zeta_1)(e^{iz} - \zeta_2)(e^{iz} - 1) = 2(\cos z - \cos \theta(z))(iz + 0(z^2)),$$

donde $\zeta_3 = 1$ corresponde a la raíz unidad de $\rho^{(1)}$ (por la hipótesis H3). Las restantes raíces ζ_j serán de la forma $\zeta_j = \gamma_j + 0(z)$, $j = 4, 5, \dots, 2k$, siendo $\gamma_j \neq 1$ por las hipótesis H3 y H4. En estas condiciones,

$$\Pi(e^{iz}, z^2) = 2(iz + 0(z^2))(\cos z - \cos \theta(z)) \prod_{j=4}^{2k} (1 - \gamma_j + 0(z)) = 0(z^{p+3})$$

de donde obtenemos

$$\cos z - \cos \theta(z) = 0(z^{p+2})$$

y entonces

$$\theta(z) = z + 0(z^{p+1}), \quad z = \lambda h$$

Además, como los valores de iniciación del método son de orden p , tendremos que la solución numérica será

$$y_n = \sum_{j=1}^{2k} A_j \zeta_j^n = C_1 e^{inz} + C_2 e^{-inz} + 0(h^{p+1}), \quad \text{para todo } n \geq 0$$

Como $z^2 \in (0, z_0^2)$ y teniendo en cuenta que $\theta(z) = z + 0(z^{p+1})$, $z = \lambda h$,

$$\zeta_1 = e^{iz} + 0(h^{p+1}), \quad \zeta_2 = e^{-iz} + 0(h^{p+1})$$

Entonces,

$$A_1 e^{inz} + A_2 e^{-inz} + \sum_{j=3}^{2k} A_j \zeta_j^n = C_1 e^{inz} + C_2 e^{-inz} + 0(h^{p+1}), \quad n \geq 0$$

de donde se deduce fácilmente que

$$A_1 = C_1 + O(h^{p+1}), A_2 = C_2 + O(h^{p+1})$$

$$A_j = O(h^{p+1}), j = 3, 4, \dots, 2k$$

2.3-Observación: La solución del problema test $y'' + \lambda^2 y = 0$ describe una trayectoria elíptica en el plano complejo. Sin embargo, cuando integramos numéricamente dicho problema mediante un método multipaso del tipo (2.1a-b), si las raíces del polinomio de estabilidad verifican $|\zeta_j| < 1$, $j = 1, 2, \dots, 2k$, la solución numérica espirala hacia dentro cuando n aumenta y decimos entonces (Stiefel & Bettis[9]) que el método tiene inestabilidad orbital. Por otro lado, cuando aplicamos métodos multipaso del tipo (2.1a-b) con intervalo de periodicidad no vacío y paso h suficientemente pequeño para que $z^2 = (\lambda h)^2 < z_0^2$, el teorema (2.2) permite deducir que la solución numérica estará dominada por las componentes periódicas correspondientes a ζ_1, ζ_2 . En consecuencia, para h suficientemente pequeño, la solución numérica describe una elipse perturbada con un error creciente en la fase y, por lo tanto, el método es orbitalmente estable. Surge en este momento una pregunta: ¿qué condiciones ha de verificar un método de tipo Cowell para ser orbitalmente estable?. Esta cuestión la resolvemos positivamente en la siguiente sección.

3. METODOS TIPO COWELL "Antisimétricos: Simétricos (AS: S)"

Siguiendo las ideas de Lambert & Watson [6], estudiamos condiciones necesarias y suficientes para que un método de tipo Cowell tenga intervalo de periodicidad no vacío.

3.1-Definición: Se dice que el polinomio $q(\zeta) = a_0 + a_1 \zeta + \dots + a_n \zeta^n$ es *simétrico* si se verifica: $a_j = a_{n-j}$, $j = 0, 1, \dots, n$, $a_0 \neq 0$.

Análogamente se dice *antisimétrico* si: $a_j = -a_{n-j}$, $j = 0, 1, \dots, n$, $a_0 \neq 0$.

3.2-Definición: Se dice que el polinomio $q(\zeta) = a_0 + a_1 \zeta + \dots + a_n \zeta^n$ es *conservativo* si todas sus raíces están sobre la circunferencia unidad.

3.3-Lema: Si $q(\zeta) = a_0 + a_1 \zeta + \dots + a_n \zeta^n$ es un polinomio simétrico (antisimétrico), entonces, si ζ^* es una raíz de $q(\zeta)$, también $1/\zeta^*$ es una raíz de $q(\zeta)$.

3.4-Lema: El producto de dos polinomios simétricos es un polinomio simétrico y el producto de un polinomio simétrico con un polinomio antisimétrico es un polinomio

antisimétrico.

3.5-Lema: Si un método $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ satisface las hipótesis H1) - H4), entonces:

$\rho^{(2)}$ simétrico y $\rho^{(1)}$ antisimétrico si y solo si $\rho^{(i)}$ conservativo, $i = 1, 2$.

Demostración:

\Rightarrow) Sean $\rho^{(2)}$ simétrico y $\rho^{(1)}$ antisimétrico, entonces por la hipótesis H4) y el Lema(3.3) se ha de verificar que los polinomios $\rho^{(i)}$, $i = 1, 2$ son conservativos.

\Leftarrow) Sean $\rho^{(i)}$, $i = 1, 2$, conservativos. Por la hipótesis H3) dichos polinomios tienen el factor $(\zeta - 1)^i$ y por la hipótesis H4) los restantes factores solo pueden ser de la forma $(\zeta - e^{-i\theta}) (\zeta - e^{i\theta})$, $0 < \theta < 2\pi$ y $(\zeta + 1)^s$, $s = 0(1)i$, $i = 1, 2$. Así pues, para el caso $i = 1$ hay un factor antisimétrico y los restantes son simétricos; y para el caso $i = 2$ todos los factores son simétricos. Entonces, aplicando el Lema(3.4) queda concluida la demostración.

3.6-Definición: Diremos que un método $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ es antisimétrico: simétrico y lo denotaremos por (AS: S), si se verifica que

$$\begin{aligned} \alpha_j^{(1)} &= -\alpha_{k-j}^{(1)} \\ \alpha_j^{(2)} &= \alpha_{k-j}^{(2)}, \quad \beta_j^{(2)} = \beta_{k-j}^{(2)}, \quad j = 0, 1, \dots, k \end{aligned} \quad (3.1)$$

Hacemos notar que $\alpha_0^{(i)} = (-1)^i \alpha_k^{(i)} \neq 0$, $i = 1, 2$, y por lo tanto $\rho^{(i)}(\zeta)$ será un polinomio antisimétrico ó simétrico según que $i = 1$ ó 2 . Sin embargo, puede ocurrir que $\beta_0^{(2)} = \beta_k^{(2)} = 0$ y $\sigma^{(2)}(\zeta)$ no será un polinomio simétrico en sentido estricto.

En los dos siguientes teoremas damos condiciones necesarias y condiciones suficientes para que un método de tipo Cowell posea un intervalo de periodicidad no vacío.

3.7-Teorema: Si un método de tipo Cowell $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ tiene intervalo de periodicidad no vacío, entonces, es antisimétrico: simétrico (AS:S) en el sentido de la Definición 3.6

Demostración: Sea $(0, z_0^2)$, $z_0^2 > 0$ el intervalo de periodicidad del método, entonces para todo $z^2 \in (0, z_0^2)$ tenemos que

$$\Pi(e^{i\theta(z)}, z^2) = \rho^{(1)}(e^{i\theta(z)}) [\rho^{(2)}(e^{i\theta(z)}) + z^2 \sigma^{(2)}(e^{i\theta(z)})] = 0$$

y como $\rho^{(1)}(e^{i\theta(z)}) \neq 0$ para todo $z \neq 0$, se deduce que

$$\rho^{(2)}(e^{i\theta(z)}) \sigma^{(2)}(e^{-i\theta(z)}) = -z^2 |\sigma^{(2)}(e^{i\theta(z)})|^2 = \text{real}$$

Entonces,

$$\text{Im} \{ \rho^{(2)}(e^{i\theta(z)}) \sigma^{(2)}(e^{-i\theta(z)}) \} = \text{Im} \sum_{j=-k}^k B_j e^{ij\theta(z)} = 0$$

o, equivalentemente

$$\sum_{j=-k}^k B_j \sin j\theta(z) = \sum_{j=0}^k (B_j - B_{-j}) \sin j\theta(z) = 0$$

de donde, $B_j = B_{-j}$, $j = 0, 1, 2, \dots, k$ y, por el Lema 5 dado en [6], se tiene que

$$\alpha_j^{(2)} = \alpha_{k-j}^{(2)}, \quad \beta_j^{(2)} = \beta_{k-j}^{(2)}, \quad j = 0, 1, \dots, k.$$

Además, para todo $z^2 \in (0, z_0^2)$, las raíces del polinomio $\Pi(\zeta, z^2)$ se encuentran sobre la circunferencia unidad, por lo tanto, el polinomio $\rho^{(1)}(\zeta)$ es conservativo y, por el Lema 3.5 es antisimétrico ($\alpha_j^{(1)} = -\alpha_{k-j}^{(1)}$, $j = 0, 1, \dots, k$, $\alpha_0^{(1)} \neq 0$).

3.8-Teorema: Sea $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ un método de tipo Cowell antisimétrico: simétrico en el sentido de la Definición 3.6 y tal que $\rho^{(2)}(\zeta)$ no tiene raíces dobles sobre la circunferencia unidad salvo la raíz principal $\zeta = 1$. Entonces, dicho método posee intervalo de periodicidad no vacío.

Demostración: Consideremos la transformación de Routh-Hurwitz $\zeta = (1 + \eta)/(1 - \eta)$, que proyecta el interior del círculo unidad $|\zeta| < 1$ en el semiplano complejo negativo $\text{Re } \eta < 0$ y la circunferencia unidad $|\zeta| = 1$ sobre el eje imaginario $\text{Re } \eta = 0$. Cuando el método $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ es AS: S, se obtiene fácilmente que el número de pasos k es par, ya que en caso contrario $\rho^{(2)}(\zeta)$ y $\sigma^{(2)}(\zeta)$ tendrían en común el factor $(\zeta + 1)$, en contradicción con la hipótesis H4) (Lambert & Watson[6]). Además tenemos que

$$r^{(1)}(\eta) = (1 - \eta)^k \rho^{(1)}\left(\frac{1 + \eta}{1 - \eta}\right) \equiv \eta R^{(1)}(\eta^2), \text{ es decir, } r^{(1)}(\eta) \text{ impar}$$

$$r^{(2)}(\eta) = (1 - \eta)^k \rho^{(2)}\left(\frac{1 + \eta}{1 - \eta}\right) \equiv R^{(2)}(\eta^2), \text{ es decir, } r^{(2)}(\eta) \text{ par}$$

$$s^{(2)}(\eta) = (1 - \eta)^k \sigma^{(2)}\left(\frac{1 + \eta}{1 - \eta}\right) \equiv S^{(2)}(\eta^2), \text{ es decir, } s^{(2)}(\eta) \text{ par}$$

Los grados de los polinomios $r^{(1)}(\eta)$, $r^{(2)}(\eta)$, $s^{(1)}(\eta)$, dependen de la paridad de k , luego podremos escribir

$$\begin{aligned} \rho^{(1)}(\zeta) &= \alpha_k^{(1)} (\zeta - 1) (\zeta + 1) \prod_{j=1}^{(k-1)/2} (\zeta - \zeta_j^{(1)}) (\zeta - \bar{\zeta}_j^{(1)}) \\ \rho^{(2)}(\zeta) &= \alpha_k^{(2)} (\zeta - 1)^2 \prod_{j=1}^{(k-1)/2} (\zeta - \zeta_j^{(2)}) (\zeta - \bar{\zeta}_j^{(2)}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

y como $\rho^{(i)}(\zeta)$, $i = 1, 2$ son polinomios antisimétrico y simétrico, respectivamente, se trata de polinomios conservativos y las raíces de ambos estarán sobre la circunferencia unidad. Los polinomios $r^{(i)}(\eta)$, $i = 1, 2$, tendrán una raíz de multiplicidad m en $\eta_0 = (\zeta_0 - 1)/(\zeta_0 + 1)$, si $\rho^{(i)}(\zeta)$, $i = 1, 2$ tiene una raíz de multiplicidad m en $\zeta = \zeta_0$, a menos que $\zeta_0 = -1$, en cuyo caso los polinomios $r^{(i)}(\eta)$, $i = 1, 2$, se reducirán a polinomios de grado $k-m$. Entonces, de (3.4) tendremos que $r^{(1)}(\eta)$ es de grado $k-1$ y como $\rho^{(2)}(\zeta)$ tiene una raíz doble en $\zeta = +1$ y $k-2$ raíces complejas conjugadas distintas sobre el círculo unidad, entonces $R^{(2)}(\eta^2)$ tiene todas sus raíces sobre el eje imaginario o, equivalentemente, $R^{(2)}(\tau)$, $\tau = \eta^2$, tiene $k/2$ raíces reales distintas satisfaciendo

$$0 = \tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \dots > \tau_{k/2} > -\infty.$$

Sin embargo, las raíces de un polinomio son funciones continuas de sus coeficientes, de donde se deduce, que para un $z^2 > 0$ suficientemente pequeño, las raíces del polinomio

$$P(\tau, z^2) = R^{(2)}(\tau) + z^2 S^{(2)}(\tau)$$

también son reales y distintas. Más concretamente, podemos encontrar un $z_1^2 > 0$ tal que para todo $z^2 \in (0, z_1^2)$, el polinomio $P(\tau, z^2)$ tiene $k/2$ raíces reales T_j , $j = 0(1)k/2$ distintas verificando

$$0 > T_2 > T_3 > \dots > T_{k/2} > -\infty.$$

Pero no podemos asegurar que la raíz T_1 correspondiente a τ_1 cuando $z \rightarrow 0$, sea menor o igual que cero.

Efectuando operaciones, encontramos que el coeficiente de $\tau^{k/2}$ en $R^{(2)}(\tau)$ es $\rho^{(2)}(-1) \neq 0$, luego existirá un $z_2^2 > 0$ tal que para todo $z^2 \in (0, z_2^2)$,

$$\text{signo} [R^{(2)}(\tau); \tau \rightarrow \infty] = \text{signo} [P^{(2)}(\tau, z^2); \tau \rightarrow \infty]$$

Además, si tenemos en cuenta que

$$\left. \frac{dR^{(2)}}{d\tau} \right|_{\tau=0} = \rho^{(2)}(-1) \prod_{j=2}^{k/2} (-\tau_j),$$

entonces

$$\text{signo} [R^{(2)}(\tau); \tau \rightarrow \infty] = \text{signo} \left[\left. \frac{dR^{(2)}}{d\tau} \right|_{\tau=0} \right]$$

Si ahora suponemos que la raíz $T_1 > 0$ y consideramos

$$P(0, z^2) = -T_1 \rho^{(2)}(-1) \prod_{j=2}^{k/2} (-T_j) + 0(z^2)$$

tenemos que para todo $z^2 \in (0, z_2^2)$

$$\text{signo} [P(0, z^2)] = - \text{signo} [P(\tau, z^2); \tau \rightarrow \infty] = - \text{signo} \left[\left. \frac{dR^{(2)}}{d\tau} \right|_{\tau=0} \right] \quad (3.5)$$

Un sencillo cálculo nos proporciona que

$$\left. \frac{dR^{(2)}}{d\tau} \right|_{\tau=0} = 2 \rho^{(2)''}(1) = 4 \sigma^{(2)}(1) = s^{(2)}(0) = \frac{4}{z^2} P(0, z^2)$$

Entonces, la igualdad (3.5) se contradice y la raíz $T_1 \leq 0$.

Así pues, podemos concluir que para todo $z^2 \in (0, z_0^2)$ con $z_0^2 = \min\{z_1^2, z_2^2\}$, el polinomio $P(\tau, z^2)$ tiene $k/2$ raíces reales negativas distintas, de donde se deduce que las raíces de $\rho^{(2)}(\zeta) + z^2 \sigma^{(2)}(\zeta)$ están sobre la circunferencia unidad y junto con el hecho de que $\rho^{(1)}(\zeta)$ es conservativo, concluimos que el método $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ tiene un intervalo de periodicidad $(0, z_0^2)$, $z_0^2 > 0$

En estos dos últimos resultados hemos obtenido condiciones necesarias y condiciones suficientes para que un método de tipo Cowell tenga intervalo de periodicidad distinto de vacío. Todos los resultados expuestos hasta ahora son similares a los obtenidos por Lambert & Watson [6] para métodos multipaso que integran el PVI especial $y'' = f(t, y)$. Nosotros hemos generalizado los resultados de Lambert & Watson [6] para métodos de tipo Cowell que utilizamos para la integración numérica directa de problemas de segundo orden $y'' = f(t, y, y')$ de tipo orbital (por ejemplo, el problema del satélite artificial terrestre con rozamiento atmosférico, movimientos oscilatorios amortiguados, etc.).

Hacemos notar que la demostración del Teorema(3.9) es constructiva, de manera que siempre que el polinomio $\rho^{(1)}(\zeta)$ sea antisimétrico podemos encontrar el intervalo de periodicidad del método de tipo Cowell examinando las condiciones bajo las cuales cierto polinomio $P(\zeta, z^2)$, relacionado con los polinomios característicos del método, tiene todas sus raíces reales, distintas y negativas.

Una forma de construir métodos de tipo Cowell con intervalo de periodicidad no vacío consiste en considerar los métodos óptimos (Henrici [4]) tales que el número de

pasos k sea par y que $\rho^{(2)}(\zeta)$ no tenga otra raíz doble de módulo unidad que la raíz principal. Con este criterio nosotros hemos construido métodos de tipo Cowell con intervalo de periodicidad no vacío hasta de orden ocho.

A continuación presentamos los coeficientes, el intervalo de periodicidad y las constantes de error de métodos de tipo Cowell implícitos y explícitos de k -pasos ($k = 2, 4, 6$), obtenidos con esta técnica y que llamaremos *métodos de tipo Lambert-Watson* en honor a estos autores:

Caso $k = 2$:

Explícito de orden 2

$$\alpha_2^{(2)} = \alpha_0^{(2)} = 1, \alpha_1^{(2)} = -2, \beta_2^{(2)} = \beta_0^{(2)} = 0, \beta_1^{(2)} = 1$$

$$\alpha_2^{(1)} = -\alpha_0^{(1)} = 1, \alpha_1^{(1)} = 0, \beta_2^{(1)} = \beta_0^{(1)} = 0, \beta_1^{(1)} = 2$$

$$\text{Interv. de period.} = (0, 4), \quad C^{(2)} = 1/12, \quad C^{(1)} = 1/6$$

Implícito de orden 4

$$\alpha_2^{(2)} = \alpha_0^{(2)} = 1, \alpha_1^{(2)} = -2, \beta_2^{(2)} = \beta_0^{(2)} = \frac{1}{12}, \beta_1^{(2)} = \frac{5}{6}$$

$$\alpha_2^{(1)} = -\alpha_0^{(1)} = 1, \alpha_1^{(1)} = 0, \beta_2^{(1)} = \beta_0^{(1)} = \frac{1}{3}, \beta_1^{(1)} = \frac{4}{3}$$

$$\text{Interv. de period.} = (0, 6), \quad C^{(2)} = -1/240, \quad C^{(1)} = -1/180$$

Caso $k = 4$:

Explícito de orden 4 ($-2 < a < 2$)

$$\alpha_4^{(2)} = \alpha_0^{(2)} = 1, \alpha_3^{(2)} = \alpha_1^{(2)} = -2 - a, \alpha_2^{(2)} = 2 + 2a$$

$$\beta_4^{(2)} = \beta_0^{(2)} = 0, \beta_3^{(2)} = \beta_1^{(2)} = \frac{14 - a}{12}, \beta_2^{(2)} = -\frac{2 + 5a}{6}$$

$$\alpha_4^{(1)} = -\alpha_0^{(1)} = 1, \alpha_3^{(1)} = -\alpha_1^{(1)} = -a, \alpha_2^{(1)} = 0$$

$$\beta_4^{(1)} = \beta_0^{(1)} = 0, \beta_3^{(1)} = \beta_1^{(1)} = \frac{8 - a}{3}, \beta_2^{(1)} = -\frac{4 + 4a}{3}$$

$$\text{Interv. de period.} = \left(0, \frac{12 + 6a}{4 + a}\right), \quad C^{(2)} = \frac{18 + a}{240}, \quad C^{(1)} = \frac{28 + a}{60 - 30a}$$

Implícito de orden 6 ($-2 < a < 2$)

$$\alpha_4^{(2)} = \alpha_0^{(2)} = 1, \alpha_3^{(2)} = \alpha_1^{(2)} = -2 - a, \alpha_2^{(2)} = 2 + 2a$$

$$\beta_4^{(2)} = \beta_0^{(2)} = \frac{18+a}{240}, \beta_3^{(2)} = \beta_1^{(2)} = \frac{26-3a}{30}, \beta_2^{(2)} = \frac{14-97a}{120}$$

$$\alpha_4^{(1)} = -\alpha_0^{(1)} = 1, \alpha_3^{(1)} = -\alpha_1^{(1)} = -a, \alpha_2^{(1)} = 0$$

$$\beta_4^{(1)} = \beta_0^{(1)} = \frac{28+a}{90}, \beta_3^{(1)} = \beta_1^{(1)} = \frac{64-17a}{45}, \beta_2^{(1)} = \frac{8-19a}{15}$$

$$\text{Interv. de period.} = (0, \frac{120+60a}{22+9a}), C^{(2)} = -\frac{190+31a}{60480}, C^{(1)} = -\frac{32+5a}{420-210a}$$

Caso k=6:

Explícito de orden 6

$$\alpha_6^{(2)} = \alpha_0^{(2)} = 1, \alpha_5^{(2)} = \alpha_1^{(2)} = -2, \alpha_4^{(2)} = \alpha_2^{(2)} = 2, \alpha_3^{(2)} = -2$$

$$\beta_6^{(2)} = \beta_0^{(2)} = 0, \beta_5^{(2)} = \beta_1^{(2)} = \frac{317}{240}, \beta_4^{(2)} = \beta_2^{(2)} = -\frac{31}{30}, \beta_3^{(2)} = \frac{291}{120}$$

$$\alpha_6^{(1)} = -\alpha_0^{(1)} = 1, \alpha_5^{(1)} = -\alpha_1^{(1)} = -1, \alpha_4^{(1)} = -\alpha_2^{(1)} = 1, \alpha_3^{(1)} = 0$$

$$\beta_6^{(1)} = \beta_0^{(1)} = 0, \beta_5^{(1)} = \beta_1^{(1)} = \frac{134}{45}, \beta_4^{(1)} = \beta_2^{(1)} = -\frac{236}{45}, \beta_3^{(1)} = \frac{384}{45}$$

$$\text{Interv. de period.} = (0, 0.802), C^{(2)} = \frac{275}{4032}, C^{(1)} = \frac{286}{2700}$$

Implícito de orden 8

$$\alpha_6^{(2)} = \alpha_0^{(2)} = 1, \alpha_5^{(2)} = \alpha_1^{(2)} = -2, \alpha_4^{(2)} = \alpha_2^{(2)} = 2, \alpha_3^{(2)} = -2$$

$$\beta_6^{(2)} = \beta_0^{(2)} = \frac{275}{4032}, \beta_5^{(2)} = \beta_1^{(2)} = \frac{1021}{1120}, \beta_4^{(2)} = \beta_2^{(2)} = -\frac{23}{2240}, \beta_3^{(2)} = \frac{5347}{5040}$$

$$\alpha_6^{(1)} = -\alpha_0^{(1)} = 1, \alpha_5^{(1)} = -\alpha_1^{(1)} = -1, \alpha_4^{(1)} = -\alpha_2^{(1)} = 1, \alpha_3^{(1)} = 0$$

$$\beta_6^{(1)} = \beta_0^{(1)} = \frac{286}{675}, \beta_5^{(1)} = \beta_1^{(1)} = \frac{294}{675}, \beta_4^{(1)} = \beta_2^{(1)} = \frac{750}{675}, \beta_3^{(1)} = \frac{40}{675}$$

$$\text{Interv. de period.} = (0, 1.019), C^{(2)} = -\frac{407}{17280}, C^{(1)} = -\frac{31933}{3628800}$$

Hemos de hacer notar que el intervalo de periodicidad es mayor en los métodos de tipo Cowell implícitos que en los explícitos y que el intervalo de periodicidad disminuye a medida que aumenta el orden tanto en implícitos como en explícitos, como cabía esperar.

4. P-ESTABILIDAD DE METODOS TIPO COWELL

El concepto de P-estabilidad está relacionado con el hecho de que el intervalo de periodicidad del método sea de longitud infinita. En esta sección presentamos algunos resultados de P-estabilidad para métodos de tipo Cowell.

4.1-Definición: Diremos que un método $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ es *P-estable* si su intervalo de periodicidad es $(0, \infty)$.

4.2-Teorema: Sea $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$ un método P-estable, entonces:

- i) El método es antisimétrico: simétrico con $\sigma^{(2)}(\zeta)$ conservativo
- ii) El método es implícito.

Demostración:

i) Es inmediato, sin más que tener en cuenta el Teorema 3.7 y observar que las raíces del polinomio $\Pi(\zeta, z)$ se aproximan a las raíces de $\rho^{(1)}(\zeta) \sigma^{(2)}(\zeta)$ cuando $z \rightarrow \infty$, siendo $\rho^{(1)}(\zeta)$ conservativo.

ii) Si suponemos que $\beta_k^{(2)} = 0$, entonces

$$s^{(2)}(1) = \sum_{j=0}^k b_j^{(2)} = 2^k \beta_k^{(2)} = 0,$$

y como todas las raíces de $s^{(2)}(\eta)$ están en el semiplano complejo $\text{Re } \eta \leq 0$ (están sobre el eje imaginario por el apartado i)), todos sus coeficientes serán de signo constante, de donde se deduce que $b_j^{(2)} = 0$, $j = 0, 1, \dots, k$, y, en particular, $\sigma^{(2)}(1) = b_0^{(2)} = 0$, en contradicción con la hipótesis H2)

Para estudiar el orden de los métodos de tipo Cowell P-estables consideramos de nuevo el polinomio de estabilidad del método expresado en la forma

$$\Pi(\zeta, \omega) = Q^{(1)}(\zeta) Q^{(2)}(\zeta, \omega), \quad \omega = iz \quad (4.1)$$

donde

$$Q^{(1)}(\zeta) = \rho^{(1)}(\zeta) \quad \text{y} \quad Q^{(2)}(\zeta, \omega) = q_k(\omega) \zeta^k + q_{k-1}(\omega) \zeta^{k-1} + \dots + q_0(\omega)$$

siendo $q_j(\omega)$, $j = 0, 1, 2, \dots, k$, polinomios de grado uno en ω^2 . Notemos que, de acuerdo con el Teorema 3.7, podemos tomar como $\rho^{(1)}(\zeta)$ un polinomio conservativo cualquiera; en particular, podemos considerar un método $\{(\rho^{(1)}, \sigma^{(1)})\}$ multipaso optimal (Henrici[4]) para problemas de primer orden y, en consecuencia, restringiremos nuestro estudio a las raíces de la ecuación polinómica

$$Q^{(2)}(\zeta, \omega) = q_k(\omega) \zeta^k + q_{k-1}(\omega) \zeta^{k-1} + \dots + q_0(\omega), \quad \omega = iz \quad (4.2)$$

4.3-Definición: Se dice que la solución de $\Pi(\zeta, \omega) = 0$ es de orden p ($p \geq 0$), si una de las raíces principales de $Q^{(2)}(\zeta, \omega)$, (p. e. $\zeta_1(\omega)$) satisface

$$e^{\omega} - \zeta_1(\omega) = C \omega^{p+1} + O(\omega^{p+2}) \quad \text{cuando } \omega \rightarrow 0$$

donde $C \neq 0$, es la constante del error de $\zeta_1(\omega)$.

El significado de esta definición está relacionado con el orden definido por la ecuación en diferencias del método y será de utilidad para estudiar el orden maximal de un método P-estable.

4.4-Corolario: El máximo orden alcanzable por un método de tipo Cowell P-estable es dos.

Demostración: Fijado $Q^{(1)}(\zeta)$ conservativo, si todas las raíces de $Q^{(2)}(\zeta, \omega) = 0$ están acotadas por uno, el orden p de la solución de $\Pi(\zeta, \omega) = 0$ satisface $p \leq 2$ grado $q_k(\tau)$, $\tau = \omega^2$ (ver Hairer[3]). En nuestro caso deseamos que las raíces de $\Pi(\zeta, \omega) = 0$ verifiquen $|\zeta| = 1$ para todo $z^2 \in (0, \infty)$; y como grado $q_k(\tau) = 1$, entonces $p \leq 2$.

5. APLICACIONES NUMERICAS

Para ilustrar el comportamiento de los métodos que hemos desarrollado a lo largo de este trabajo, realizamos una aplicación de ellos a dos problemas test cuya solución es de carácter periódico.

Consideraremos los métodos de tipo Lambert-Watson de la sección 3 (con $a = 0$) y el clásico método de Cowell, todos ellos de órdenes 6 y 8 para resolver numéricamente los siguientes problemas lineales y no lineales. La iniciación de los métodos se realizó, en cada caso, con la solución exacta del problema correspondiente.

Ejemplo 1: El sistema lineal de segundo orden

$$y'' = y + 4z$$

$$z'' = -2y - 5z$$

que tiene la solución exacta $y = 2 \cos(t)$, $z = -\cos(t)$. Calculamos la solución numérica en $t = 40\pi$, para los pasos de integración $h = \pi/36, \pi/24, \pi/16, \pi/12, \pi/8, \pi/6$. Los errores absolutos (sol. exacta - sol. numérica) en norma $\|\cdot\|_2$, se muestran en las tablas que vienen a continuación.

ORDEN 8

Paso de integración	Met. Cowell	Met. tipo Lambert-Watson
$h = \pi/36$	0.314×10^{-9}	0.327×10^{-10}
$h = \pi/24$	0.158×10^{-7}	0.984×10^{-11}
$h = \pi/16$	0.449×10^{-6}	0.502×10^{-7}
$h = \pi/12$	0.579×10^{-5}	0.691×10^{-6}
$h = \pi/8$	0.229×10^{-3}	0.100×10^{-5}
$h = \pi/6$	0.239×10^{-2}	0.465×10^{-3}

ORDEN 6

Paso de integración	Met. Cowell	Met. tipo Lambert-Watson
$h = \pi/36$	0.331×10^{-7}	0.853×10^{-8}
$h = \pi/24$	0.889×10^{-6}	0.901×10^{-9}
$h = \pi/16$	0.958×10^{-5}	0.252×10^{-5}
$h = \pi/12$	0.713×10^{-4}	0.192×10^{-5}
$h = \pi/8$	0.172×10^{-2}	0.953×10^{-4}
$h = \pi/6$	0.871×10^{-2}	0.268×10^{-2}

Ejemplo 2 : El problema no lineal

$$z'' + (1 + \gamma + \gamma\delta e^{-2it}) z = \gamma e^{-it} z^2$$

$$z(0) = 1 + \delta, z'(0) = i(1 - \delta)$$

con $\gamma \geq 0, 0 \leq \delta \leq 1$, donde δ es un parámetro de distorsión y γ un parámetro de no linealidad. La solución exacta del problema es $z(t) = e^{it} + \delta e^{-it}$ y representa una elipse en el plano complejo. El problema ha sido resuelto como un sistema acoplado de ecuaciones diferenciales reales, en el punto $t = 10\pi$, para $h = \pi/12, \gamma = 0.1 \times 10^{-5}$ y diferentes valores del parámetro δ . A continuación presentamos los errores absolutos (sol. exacta - sol. numérica), en norma $\|\cdot\|_2$ solamente para el caso de orden 8.

Valor del parámetro δ	Met. Cowell	Met. tipo Lambert-Watson
$\delta = 0$	0.938×10^{-6}	0.239×10^{-6}
$\delta = 0.1$	0.975×10^{-6}	0.264×10^{-6}
$\delta = 0.2$	0.102×10^{-5}	0.235×10^{-6}
$\delta = 0.3$	0.107×10^{-5}	0.205×10^{-6}
$\delta = 0.4$	0.113×10^{-5}	0.176×10^{-6}
$\delta = 0.5$	0.119×10^{-5}	0.147×10^{-6}

Los resultados numéricos presentados en las tablas fueron obtenidos en el ordenador VAX 780 del Centro de Cálculo de la Universidad de Zaragoza con métodos numéricos del mismo orden en cada caso, es decir, métodos comparables en términos de aproximación local. De estos resultados se desprenden las siguientes conclusiones:

- Los métodos que tienen propiedades de periodicidad o estabilidad orbital (métodos de tipo Lambert-Watson) dan mejores resultados que los que no tienen estas propiedades (método clásico de Cowell).
- En el caso del ejemplo 2 se observa que la solución proporcionada por el clásico método de Cowell degenera cuando el parámetro de distorsión δ aumenta, mientras que los métodos de tipo Lambert-Watson que tienen propiedades de estabilidad orbital mejoran su aproximación.

Agradecimientos

La realización de este trabajo ha sido parcialmente subvencionada por el Proyecto nº PB87-0637 de la CICYT.

Referencias

- [1] - FRANCO, J.M. y PALACIOS, M.: "*Une classe de methodes numeriques pour l'integration directe d'equations differentielles du type $y' = f(t, y, y')$* ", Rev. Acad. Ciencias 42 (1987) 45-67
- [2] - FRANCO, J.M. y PALACIOS, M.: "*Estabilidad absoluta lineal de métodos lineales multipaso de tipo Cowell*", Rev. Acad. Ciencias (en este número)
- [3] - HAIRER, E.: "*Unconditionally stable methods for second order differential equations*", Numer. Math., 32 (1979) 373-379
- [4] - HENRICI, P.: "*Discrete variable methods in ODE*", Wiley, New York, (1962)
- [5] - KAMBO, N.S., JAIN, R.K. and GOEL, R.: "*A fourth-order method for $y' = f(t, y, y')$* ", J. Comp. Appl. Math., 9 (1983) 81-90
- [6] - LAMBERT, J.D., and WATSON, I.A.: "*Symmetric multistep methods for periodic IVP's*", J. IMA, 18 (1976) 189-202
- [7] - MOORE, P.: "*Orbitally stable multistep methods*", Celes. Mech., 17 (1978) 281-297
- [8] - PRINCE, P.J. and DORMAND, J.R.: "*High order embedded Runge-Kutta formulae*", J. Comp. Appl. Math., 11 (1981) 277-281
- [9] - STIEFEL, E. and BETTIS, L.G.: "*Stabilization of Cowell's methods*", Numer. Math., 13 (1969) 154-175

ESTABILIDAD ABSOLUTA DE METODOS LINEALES MULTIPASO DE TIPO COWELL

J.M. FRANCO Y M. PALACIOS

Departamento de Matemática Aplicada (E.T.S.I.I.).
Universidad de Zaragoza. 50015 ZARAGOZA (España).

An important characterization of a numerical method for first order ODE's is the absolute stability. In this paper the absolute stability of Cowell-type linear multistep methods for direct integration of second order ODE are studied. The concepts of absolute stability, stability region are defined and the stability polynomial for methods of Cowell-type is obtained. Stability regions are obtained for the classical Cowell method using a second order scalar test equation. Finally, a family of A-stable methods of two step and second order of accuracy using a scalar test equation with real coefficients is obtained.

1. INTRODUCCION

Los sistemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden del tipo

$$y''(t) = f(t, y(t), y'(t)) \quad (1.1)$$

aparecen de forma natural en la simulación de muchos problemas físicos; por ejemplo, las ecuaciones del movimiento de los problemas de mecánica celeste en formulación de Cowell responden a este tipo, así como la mayoría de los problemas de la mecánica orbital. Una forma de atacar numéricamente el problema (1.1) consiste en reducirlo a un sistema doble de primer orden y resolverlo mediante un método numérico estandar de tipo Adams, Runge-Kutta, etc.; otra posibilidad consiste en utilizar un método de integración directa, como los métodos de tipo Cowell. Es claro que hay ciertas ventajas de rapidez y almacenamiento en el tratamiento directo de ecuaciones de orden elevado, pero Gear[2] sugiere que hay ciertos peligros desde el punto de vista de la estabilidad, a menos que se disponga de un mecanismo de control del error local del método.

Si en las ecuaciones (1.1) la primera derivada no aparece explícitamente, es

decir, $y'' = f(t, y)$, el problema suele integrarse mediante los clásicos métodos de Störmer-Cowell (Henrici[4]) y la estabilidad de estos métodos tomando como test la ecuación del oscilador armónico ha sido estudiada por diversos autores como Vélez et al.[7], Lambert[5], Lambert and Watson[6] etc.

Los autores[1] han propuesto una clase de métodos multipaso de tipo Cowell de integración directa, conocidos como PFML (Pares de Formulas Multipaso Lineales), que para problemas orbitales del tipo (1.1) resultan más eficientes que los métodos estándar que integran ecuaciones de primer orden. En [1] se estudian propiedades de consistencia, estabilidad y convergencia de los métodos de tipo Cowell que vienen definidos por las ecuaciones en diferencias

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j^{(2)} y_{n+j} = h^2 \sum_{j=0}^k \beta_j^{(2)} f(t_{n+j}, y_{n+j}, y'_{n+j}) \quad (1.2a)$$

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j^{(1)} y_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j^{(1)} f(t_{n+j}, y_{n+j}, y'_{n+j}) \quad (1.2b)$$

y que denotamos por $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$. Pero el concepto de estabilidad estudiado en [1] resulta apropiado para problemas del tipo (1.1), tales que el producto de la constante de Lipschitz de la función $f(\cdot)$ por la longitud del intervalo de integración no sea demasiado grande, ya que las constantes de estabilidad en las acotaciones del error dependen de este producto.

Por otra parte, es frecuente que los modelos físicos a integrar representen problemas físicamente estables y, por lo tanto, para un buen funcionamiento del método numérico, hay que exigir que la solución numérica tenga propiedades análogas a la solución analítica del problema.

En este trabajo, la cuestión específica consiste en el estudio de la estabilidad absoluta lineal de los métodos (1.2), es decir, bajo qué condiciones la solución numérica decae cuando $n \rightarrow \infty$, para un paso fijo h . En particular, estudiamos el comportamiento de estabilidad de los métodos (1.2) frente a la ecuación escalar de prueba

$$y'' = \theta y' + \nu y, \quad \theta, \nu \in \mathbb{C} \quad (1.3)$$

que nos proporcionará una primera indicación a cerca del comportamiento de los métodos de tipo Cowell. En el epígrafe 2 generalizamos los conceptos clásicos de A-estabilidad y polinomio de estabilidad para los métodos de tipo Cowell; en el 3, estudiamos la obtención de la región de estabilidad de los métodos y, mediante procesos gráficos, obtenemos algunas regiones de estabilidad para el clásico método de Cowell estudiado en [1]; en el 4, estudiamos la A-estabilidad de métodos tipo Cowell de dos pasos y, en un caso particular, obtenemos métodos A-estables de orden dos.

2. REGION Y POLINOMIO DE ESTABILIDAD

En este epígrafe, establecemos las definiciones de *dominio de estabilidad*, *región de estabilidad* y obtenemos la expresión del polinomio de estabilidad para ecuaciones diferenciales escalares de prueba de la forma

$$y'' = \theta y' + v y, \quad \theta, v \in \mathbb{C} \quad (2.1)$$

donde θ y v son constantes complejas. Como es bien conocido (ver [3]), si todo γ_i valor propio o raíz del polinomio característico de la ecuación (2.1) es tal que $\operatorname{Re} \gamma_i \leq 0$, la solución de (2.1) es estable y está uniformemente acotada para todo $t \geq 0$. En particular, si $\operatorname{Re} \gamma_i < 0$ para todo γ_i valor propio asociado a la ecuación (2.1), entonces, la solución es asintóticamente estable y $|y(t)| \rightarrow 0$ ($t \rightarrow \infty$), cualesquiera que sean las condiciones iniciales.

Si aplicamos el método de k -pasos dado en (1.2) a la ecuación de prueba (2.1) con paso fijo h , obtenemos las ecuaciones en diferencias

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^k [(\alpha_j^{(2)} - h^2 v \beta_j^{(2)}) y_{n+j} - h \theta \beta_j^{(2)} (hy'_{n+j})] &= 0 \\ \sum_{j=0}^k [(\alpha_j^{(1)} - h \theta \beta_j^{(1)}) (hy'_{n+j}) - h^2 v \beta_j^{(1)} y_{n+j}] &= 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

Sería deseable que la solución numérica de (2.2) presentara un comportamiento asintótico similar al de la solución analítica de la ecuación diferencial (2.1), es decir, que para los γ_i valores propios asociados a (2.1) tales que $\operatorname{Re} \gamma_i \leq 0$, la solución numérica dada por (2.2) esté uniformemente acotada. En general, esto no es cierto; para precisar los valores $z_1 = h^2 v$, $z_2 = h \theta$, para los que se verifica esta propiedad introducimos la siguiente

2.1-Definición: Llamaremos *dominio de estabilidad absoluta*, D , del método lineal $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$, al conjunto de puntos $z_1 = h^2 v$, $z_2 = h \theta$ del plano complejo para los cuales las ecuaciones en diferencias

$$\begin{aligned} y_n &= \eta_n, \quad y'_n = \eta'_n, \quad n = 0, 1, \dots, k-1 \\ \sum_{j=0}^k [(\alpha_j^{(2)} - z_1 \beta_j^{(2)}) y_{n+j} - z_2 \beta_j^{(2)} (hy'_{n+j})] &= 0 \\ \sum_{j=0}^k [(\alpha_j^{(1)} - z_2 \beta_j^{(1)}) (hy'_{n+j}) - z_1 \beta_j^{(1)} y_{n+j}] &= 0, \quad n \geq 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

tienen solución única verificando

$$\sup_{n \geq 0} |y_n^{(i)}| \leq K_i \sup_{0 \leq n \leq k-1} \{ |\eta_n|, |\eta'_n| \}, \quad i = 0, 1 \quad (2.4)$$

donde K_0 y K_1 son constantes independientes de las condiciones iniciales, pero que pueden depender de z_1 y z_2 .

2.2-Observación: Si en lugar de considerar ecuaciones escalares de la forma (2.1), consideramos sistemas lineales

$$y'' = R y' + S y,$$

donde R y S son matrices diagonalizables simultaneamente, es inmediato que la solución numérica será acotada en el sentido de (2.4) si y solo si $h^2 v_j$, $h \theta_j$ pertenecen al dominio de estabilidad absoluta, para v_j, θ_j valores propios de R y S respectivamente.

Introduciendo la siguiente notación matricial

$$Y_{n+k} = [y_{n+k}, hy'_{n+k}, y_{n+k-1}, hy'_{n+k-1}, \dots, y_{n+1}, y'_{n+1}]^T$$

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_k^{(2)} - z_1 \beta_k^{(2)} & -z_2 \beta_k^{(2)} & 0 & \dots & 0 \\ -z_1 \beta_k^{(1)} & \alpha_k^{(1)} - z_2 \beta_k^{(1)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ 0 & 0 & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} -\alpha_{k-1}^{(2)} + z_1 \beta_{k-1}^{(2)} & z_2 \beta_{k-1}^{(2)} & \dots & -\alpha_0^{(2)} + z_1 \beta_0^{(2)} & z_2 \beta_0^{(2)} \\ z_1 \beta_{k-1}^{(1)} & -\alpha_{k-1}^{(1)} + z_2 \beta_{k-1}^{(1)} & \dots & z_1 \beta_0^{(1)} & -\alpha_0^{(1)} + z_2 \beta_0^{(1)} \\ 1 & & & & \\ & & & 0 & \\ 0 & & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\eta = [\eta_{k-1}, h\eta'_{k-1}, \eta_{k-2}, h\eta'_{k-2}, \dots, \eta_0, h\eta'_0]^T$$

las ecuaciones (2.3) y (2.4) pueden escribirse matricialmente en la forma

$$\begin{cases} Y_{n+k} = \eta \\ A Y_{n+k} = B Y_{n+k-1}, \quad n \geq 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

$$\sup_{n \geq k-1} \|Y_n\|_{\infty} \leq K \|\eta\|_{\infty} \quad (2.6)$$

Las raíces del polinomio característico asociado a la ecuación en diferencias matricial (2.5) vienen dadas por la solución del problema de valores propios generalizado

$$[B - w A] X = 0 \quad (2.7)$$

Resolviendo las $2k-2$ últimas ecuaciones del sistema (2.7), obtenemos que la solución verifica las relaciones siguientes

$$\begin{aligned} x_{2j} &= w^{k-j} x_{2k} \\ x_{2j-1} &= w^{k-j} x_{2k-1} \end{aligned} \quad j = 1, 2, \dots, k-1 \quad (2.8)$$

Aplicando las relaciones (2.8) a las restantes ecuaciones del sistema (2.7), éste queda reducido a la forma

$$\begin{bmatrix} -\rho^{(2)}(w) + z_1 \sigma^{(2)}(w) & z_2 \sigma^{(2)}(w) \\ z_1 \sigma^{(1)}(w) & -\rho^{(1)}(w) + z_2 \sigma^{(1)}(w) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{2k-1} \\ x_{2k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

siendo

$$\rho^{(i)}(w) = \sum_{j=0}^k \alpha_j^{(i)} w^j, \quad \sigma^{(i)}(w) = \sum_{j=0}^k \beta_j^{(i)} w^j, \quad i = 1, 2$$

los polinomios característicos del método. En consecuencia, podemos escribir el polinomio característico o polinomio de estabilidad asociado a la ecuación en diferencias (2.5), como

$$\Pi(w, z_1, z_2) = q_1(w) z_1 + q_2(w) z_2 + q_3(w) \quad (2.10)$$

donde q_1 , q_2 y q_3 son polinomios de grado menor o igual que $2k$ definidos por

$$\begin{aligned} q_1(w) &= -\sigma^{(2)}(w) \rho^{(1)}(w) \\ q_2(w) &= -\rho^{(2)}(w) \sigma^{(1)}(w) \\ q_3(w) &= \rho^{(2)}(w) \rho^{(1)}(w) \end{aligned} \quad (2.11)$$

De acuerdo con esto, estableceremos la siguiente

2.3-Definición: Llamaremos región de estabilidad absoluta, S , del método lineal $\{(\rho^{(i)}, \sigma^{(i)}), i = 1, 2\}$, al conjunto de puntos del plano complejo tales que las raíces del polinomio $\Pi(w, z_1, z_2)$ son de módulo menor que la unidad, para todo $z_1, z_2 \in S$.

$$S = \{ (z_1, z_2) \in \mathbb{C}^2 \mid \text{si } \Pi(w, z_1, z_2) = 0 \Rightarrow |w| < 1 \}$$

2.4-Observación: Para $z_1 = z_2 = 0$, se tiene que $\Pi(w, 0, 0) = \rho^{(2)}(w) \rho^{(1)}(w)$, y por lo tanto, si $\rho^{(2)}(w)$ y $\rho^{(1)}(w)$ verifican la condición de las raíces dada en [1], entonces, el origen pertenece a la frontera de la región de estabilidad.

3. DETERMINACION DE LA REGION DE ESTABILIDAD (S)

Consideraremos la ecuación escalar de prueba (2.1) expresada en la forma

$$y'' = (\gamma_1 + \gamma_2) y' - \gamma_1 \gamma_2 y \quad (3.1)$$

donde γ_1 y γ_2 son los valores propios asociados a dicha ecuación. Escribiendo $\lambda_1 = h \gamma_1$, $\lambda_2 = h \gamma_2$, el polinomio de estabilidad (2.10) adoptará la forma

$$\Pi(w, \lambda_1, \lambda_2) = -\lambda_1 \lambda_2 q_1(w) + (\lambda_1 + \lambda_2) q_2(w) + q_3(w) \quad (3.2)$$

Como la región de estabilidad S está determinada en el (λ_1, λ_2) -espacio por la condición de que las raíces del polinomio de estabilidad (3.2) se encuentren en el interior del círculo unidad, es claro que el contorno de dicha región estará contenido en el lugar geométrico de los puntos tales que las raíces del polinomio (3.2) estén sobre la circunferencia unidad ($w = e^{i\theta}$). Este razonamiento junto con la anulación de (3.2), nos permite obtener una relación bilineal simétrica (en el sentido de Gear[2]) entre los parámetros complejos λ_1 y λ_2 dada por

$$\lambda_1 = \frac{q_3(\theta) - \lambda_2 q_2(\theta)}{\lambda_2 q_1(\theta) - q_2(\theta)} \quad (3.3)$$

Esta relación tiene dos puntos fijos μ_1, μ_2 para cada θ ($\lambda_1 = \lambda_2 = \mu$), que son las soluciones de la ecuación

$$\mu^2 q_1(\theta) - 2\mu q_2(\theta) - q_3(\theta) = 0 \quad (3.4)$$

La transformación dada en (3.3) queda completamente caracterizada por sus puntos fijos μ_1 y μ_2 en el siguiente sentido: dicha transformación consiste en una inversión respecto de la circunferencia Γ de diámetro $\mu_2 - \mu_1$, seguida de una simetría respecto de la línea recta que une los puntos μ_1 y μ_2 , como se puede ver en la figura 1.

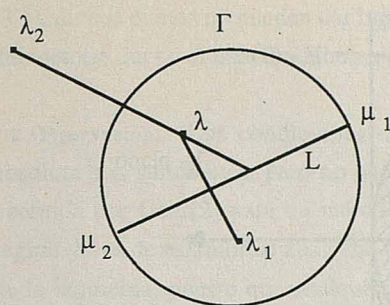


Figura 1

λ es una inversión de λ_2 en Γ

λ_1 es una simetría de λ en L

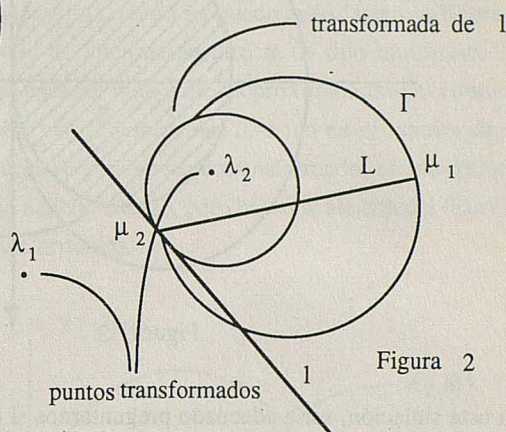


Figura 2

La transformada de una línea recta es una circunferencia pasando por el centro de Γ . En particular, la transformada de cualquier recta pasando por de uno de los puntos fijos μ_i , $i = 1, 2$, es una circunferencia tangente a dicha recta en el punto fijo (ver la figura 2). De acuerdo con esto, el semiplano abierto que se encuentra en el lado opuesto al otro punto fijo y de la línea recta l , se transforma en el interior de la circunferencia transformada de la línea l , siendo dicho semiplano y su transformado dos conjuntos disjuntos. Entonces, si dos puntos λ_1 y λ_2 están en dicho semiplano, no pueden ser cotransformados, es decir, dar lugar a una raíz $w = e^{i\theta}$ del polinomio de estabilidad (3.2).

Además, para cada λ_2 , la ecuación (3.3) especifica un λ_1 , de manera que una raíz del polinomio de estabilidad (3.2) sea de la forma $w = e^{i\theta}$. Entonces, para cada λ_2 , la ecuación (3.3) especifica un lugar geométrico que contiene al contorno de una región en el λ -plano en la que el método es estable, suponiendo que dicha región exista. Nosotros estamos interesados en encontrar una región S tal que si $\lambda_1, \lambda_2 \in S$, entonces el método es estable. Claramente, habrá que excluir de la región S los puntos fijos μ_1 y μ_2 , soluciones de la ecuación (3.4).

Consideraremos ahora la figura 3 y supongamos que exista al menos un par de valores λ_1, λ_2 en el interior de la región acotada S para los cuales el método es estable.

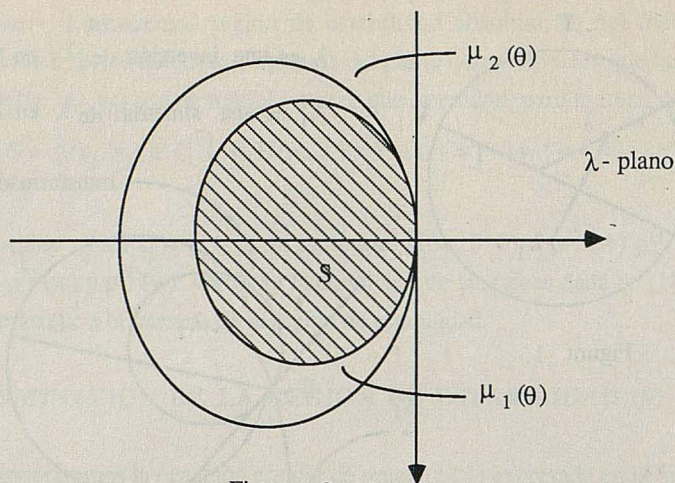


Figura 3

En esta situación, sería adecuado preguntarnos si el método es estable para todos los valores λ_1^*, λ_2^* contenidos en S . En general, la respuesta es negativa, ya que Gear[2] ha encontrado métodos que tienen región de estabilidad en el sentido de la figura 3 y, en cambio, no son estables para todo par de valores λ_1^*, λ_2^* contenidos en S . Una condición suficiente para que la región S sea de estabilidad absoluta para el operador numérico (2.5) es que S sea un conjunto conexo. Este resultado viene precisado en el siguiente teorema (Gear[2])

3.1-Teorema: Sea S una región conexa verificando que:

- i) No contiene parte de ninguna línea segmento $\mu_2 - \mu_1$
- ii) Existen un par de puntos $\lambda_1, \lambda_2 \in S$ en los que el método es estable

Entonces, el método es absolutamente estable en todos los puntos de S .

Demostración: Sean $\lambda_1, \lambda_2 \in S$ para los cuales el método es estable, y supongamos que existen $\lambda_1^*, \lambda_2^* \in S$ en los que el método no es estable. Entonces podemos encontrar un par de caminos $\lambda_1(s), \lambda_2(s)$ continuos y contenidos en S , tales que unen los puntos λ_1 a λ_1^* y λ_2 a λ_2^* respectivamente. Como λ_1^* y λ_2^* son puntos de inestabilidad del método, existen dos puntos $\lambda_1(s_0)$ y $\lambda_2(s_0)$ sobre dichos caminos para los cuales el polinomio de estabilidad del método tiene una raíz sobre la circunferencia unidad. Además, existirá una línea recta pasando por uno de los puntos fijos de forma que $\lambda_1(s_0)$ y $\lambda_2(s_0)$ se encuentren en el semiplano determinado por dicha línea y en el lado opuesto al otro punto fijo. Entonces, por la forma especial de la transformación

(3.3), dichos puntos no pueden dar lugar a una raíz unidad del polinomio de estabilidad del método, luego el método debe ser estable en λ_1^*, λ_2^* .

3.2-Observación: Las condiciones del teorema anterior a cerca de la estabilidad absoluta son suficientes, pero no necesarias, como se puede apreciar en la figura 4, obtenida por Gear[2] para un método de integración directa de tipo multipaso. La región S es de estabilidad absoluta, excepto quizás en las proximidades del contorno de la izquierda, puesto que cualquier par de puntos de S , están en el interior de un círculo de diámetro $\mu_2 - \mu_1$ y entonces no pueden ser cotransformados el uno del otro, o bien uno de ellos está muy próximo a dicho círculo, pero bastante alejado del diámetro $\mu_2 - \mu_1$, y tampoco pueden ser cotransformados.

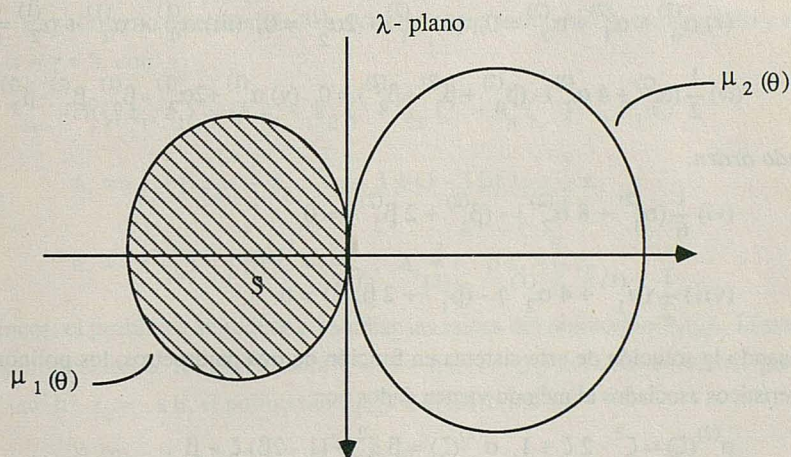


Figura 4

Al final, presentamos algunas regiones de estabilidad absoluta correspondientes a los métodos de tipo Cowell obtenidos en [1], para los casos de dos, tres, y cuatro pasos con órdenes tres, cuatro y cinco respectivamente. Se observa inmediatamente que la superficie encerrada en estas regiones de estabilidad es similar a las obtenidas por Shampine and Gordon [8] para métodos multipaso de tipo Adams.

4. A-ESTABILIDAD DE METODOS DE DOS PASOS

En esta sección, obtenemos métodos de integración directa de tipo Cowell A-estables de dos pasos y segundo orden de aproximación, considerando la ecuación test escalar de coeficientes reales

$$y'' + a y + \omega^2 y = 0 \quad (4.1)$$

con la condición $a \geq 0$, lo que equivale a exigir que la solución de la ecuación (4.1) es estable.

Consideremos métodos de tipo Cowell de dos pasos en la forma

$$\alpha_2^{(2)} y_{n+2} + \alpha_1^{(2)} y_{n+1} + \alpha_0^{(2)} y_n = h^2 (\beta_2^{(2)} f_{n+2} + \beta_1^{(2)} f_{n+1} + \beta_0^{(2)} f_n)$$

$$\alpha_2^{(1)} y'_{n+2} + \alpha_1^{(1)} y'_{n+1} + \alpha_0^{(1)} y'_n = h (\beta_2^{(1)} f_{n+2} + \beta_1^{(1)} f_{n+1} + \beta_0^{(1)} f_n)$$

Suponiendo, sin pérdida de la generalidad, que $\alpha_2^{(2)} = \alpha_2^{(1)} = 1$ e imponiendo las condiciones de orden dadas en Franco-Palacios [1], tenemos

Primer orden.

$$(i) \alpha_0^{(2)} + \alpha_1^{(2)} + \alpha_2^{(2)} = 0, \quad (ii) \alpha_1^{(2)} + 2\alpha_2^{(2)} = 0, \quad (iii) \alpha_0^{(1)} + \alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} = 0$$

$$(iv) \frac{1}{2} (\alpha_1^{(2)} + 4\alpha_2^{(2)}) - (\beta_0^{(2)} + \beta_1^{(2)} + \beta_2^{(2)}) = 0, \quad (v) \alpha_1^{(1)} + 2\alpha_2^{(1)} - \beta_0^{(1)} - \beta_1^{(1)} - \beta_2^{(1)} = 0$$

Segundo orden.

$$(vi) \frac{1}{6} (\alpha_1^{(2)} + 8\alpha_2^{(2)}) - (\beta_1^{(2)} + 2\beta_2^{(2)}) = 0$$

$$(vii) \frac{1}{2} (\alpha_1^{(1)} + 4\alpha_2^{(1)}) - (\beta_1^{(1)} + 2\beta_2^{(1)}) = 0$$

Expresando la solución de este sistema en función de tres parámetros, los polinomios característicos asociados al método vienen dados por

$$\rho^{(2)}(\zeta) = \zeta^2 - 2\zeta + 1, \quad \sigma^{(2)}(\zeta) = \beta \zeta^2 + (1 - 2\beta) \zeta + \beta$$

$$\rho^{(1)}(\zeta) = \zeta^2 - (1 + \alpha) \zeta + \alpha, \quad \sigma^{(1)}(\zeta) = \left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2} + \gamma\right) \zeta^2 + \left(\frac{1}{2} - \frac{3}{2}\alpha - 2\gamma\right) \zeta + \gamma$$

En estas condiciones, el polinomio de estabilidad asociado al método de dos pasos será

$$\Pi(\zeta, z_1, z_2) = a_0 + a_1 \zeta + a_2 \zeta^2 + a_3 \zeta^3 + a_4 \zeta^4 \quad (4.2)$$

donde

$$a_0 = \alpha - \alpha \beta z_1 - \gamma z_2$$

$$a_1 = -(1 + 3\alpha) + (-\alpha + \beta + 3\alpha\beta) z_1 + \left(-\frac{1}{2} + \frac{3}{2}\alpha + 4\gamma\right) z_2$$

$$a_2 = 3(1 + \alpha) + (1 + \alpha - 3\beta - 3\alpha\beta) z_1 + \left(\frac{1}{2} - \frac{7}{2}\alpha - 5\gamma\right) z_2$$

$$a_3 = -(3 + \alpha) + (-1 + 3\beta + \alpha\beta)z_1 + \left(\frac{1}{2} + \frac{5}{2}\alpha + 4\gamma\right)$$

$$a_4 = 1 - \beta z_1 - \left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2} + \gamma\right)z_2$$

A continuación estudiaremos dos casos particulares

Caso $a_1 = a_0 = 0$

El polinomio de estabilidad será bicuadrático, pero al imponer que $a_1 = 0$, se llega a una contradicción. Por lo tanto, no existe ningún método de dos pasos y segundo orden cuyo polinomio de estabilidad sea bicuadrático.

Caso $a_0 = 0$

El polinomio de estabilidad es reducible a un polinomio de tercer grado y resulta que $\alpha = \gamma = 0$, con

$$\Pi(\zeta, z_1, z_2) = \zeta(a_1 + a_2\zeta + a_3\zeta^2 + a_4\zeta^3) = \zeta P_3(\zeta)$$

$$a_1 = -1 + \beta z_1 - \frac{1}{2}z_2, \quad a_2 = 3 + (1 - 3\beta)z_1 + \frac{1}{2}z_2$$

$$a_3 = -3 - (1 - 3\beta)z_1 + \frac{1}{2}z_2, \quad a_4 = 1 - \beta z_1 - \frac{1}{2}z_2$$

Entonces, el problema se reduce a estudiar las raíces del polinomio $P_3(\zeta)$. Efectuando la transformación de Routh-Hurwitz $\zeta = (1 + \eta)/(1 - \eta)$ y teniendo en cuenta que ahora $z_1 = -\omega^2 h^2$, $z_2 = -ah$, el polinomio $P_3(\zeta)$ se transforma en

$$P_3(\eta) = b_0 + b_1\eta + b_2\eta^2 + b_3\eta^3$$

con

$$b_0 = a_4 + a_3 + a_2 + a_1 = 0$$

$$b_1 = 3a_4 + a_3 - a_2 - 3a_1 = 2\omega^2 h^2$$

$$b_2 = 3a_4 - a_3 - a_2 + 3a_1 = 4ah$$

$$b_3 = a_4 - a_3 + a_2 - a_1 = 8 + 2(4\beta - 1)\omega^2 h^2$$

En estas condiciones, exigir que las raíces de $P_3(\zeta)$ sean de módulo menor o igual que la unidad es equivalente a exigir que las raíces de $P_3(\eta)$ estén en el semiplano $\operatorname{Re} \eta \leq 0$. Aplicando el criterio de Routh-Hurwitz, esto solamente es cierto si se verifican las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} b_3 > 0, \quad b_2, b_1, b_0 &\geq 0 \\ b_2 b_1 &\geq b_3 b_0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

En nuestro caso, los coeficientes b_i ($i = 0, 1, 2, 3$) verifican las condiciones (4.3) para todo $ah, \omega^2 h^2$, si y solo si $\beta \geq 1/4$. Además, como $b_0 = 0$, el polinomio $P_3(\zeta)$ no puede tener raíces múltiples de módulo unidad, salvo que $a = \omega = 0$; y en este caso, de acuerdo con la observación (2.4), estos puntos están sobre la frontera de la región de estabilidad.

En consecuencia, podemos concluir que la familia de métodos de tipo Cowell de dos pasos y segundo orden dada por

$$\begin{aligned} y_{n+2} - 2y_{n+1} + y_n &= h^2 (\beta f_{n+2} + (1-2\beta) f_{n+1} + \beta f_n), \quad \beta \geq 1/4 \\ y'_{n+2} - y'_{n+1} &= \frac{h}{2} (f_{n+2} + f_{n+1}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

es A-estable.

4.1-Observación: Si se imponen condiciones de orden tres, se tiene que $\beta = 1/12$, $\alpha = -(1 + 12\gamma)/5$. Considerando el caso particular $a = 0$, se tiene que

$$\Pi(\zeta, \omega^2 h^2, 0) = \rho^{(1)} [\rho^{(2)}(\zeta) + \omega^2 h^2 \sigma^{(2)}(\zeta)]$$

y en el segundo factor de este polinomio se verifica la condición de A-estabilidad (condición de las raíces de Dahlquist) si y solo si $\omega^2 h^2 \in (0, 6)$. En consecuencia, no existe ningún método de tipo Cowell de dos pasos y orden tres que sea A-estable.

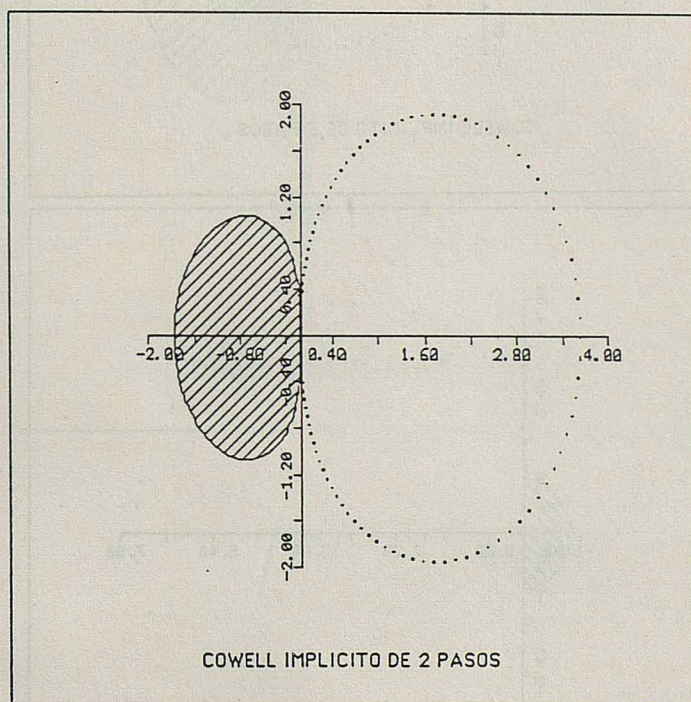
Agradecimientos

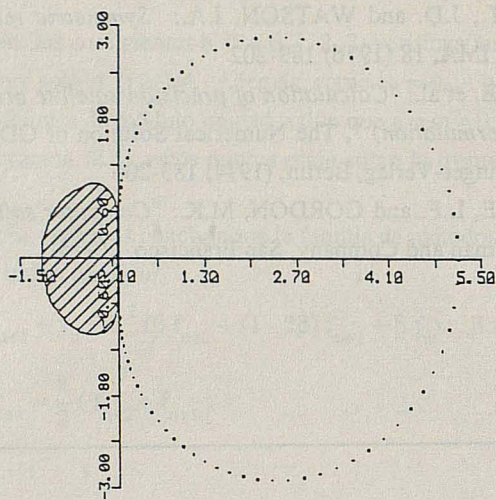
La realización de este trabajo ha sido parcialmente subvencionada por el Proyecto n° PB87-0637 de la CICYT.

Referencias:

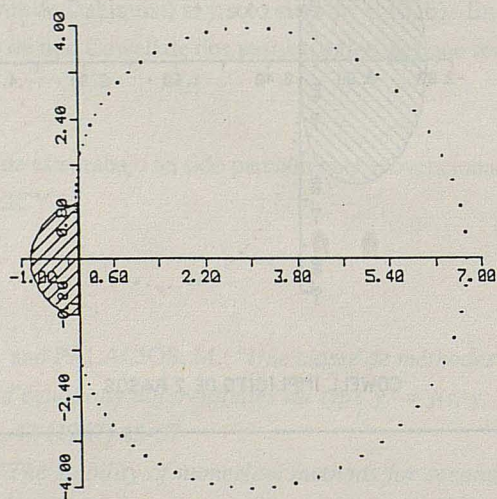
- [1] - FRANCO, J.M. and PALACIOS, M.: "Une classe de méthodes numériques pour l'intégration directe d'équations différentielles du type $y'' = f(t, y, y')$ ", Rev. Acad. Ciencias de Zaragoza, 42 (1987) 45-67
- [2] - GEAR, W.C.: "The stability of numerical methods for second order ODE's", SIAM J. Numer. Anal., 1 (1978) 188-197
- [3] - GLADWELL, I. and THOMAS, R.M.: "A qualitative analysis of two and three-step methods for stable second order ODE's", SIAM J. Numer. Anal., 3 (1985) 535-560

- [4] - HENRICI, P.: "Discrete variable methods in ODE ", Wiley, New York, (1962)
- [5] - LAMBERT., J.D.: "Computational methods in ODE ", Wiley, Bélgica, (1973)
- [6] - LAMBERT., J.D. and WATSON, I.A.: "Symmetric multistep methods for periodic IVP ", J. IMA, 18 (1976) 189-202
- [7] - VELEZ, C.E. et al.: "Calculation of precision satellite orbits with nonsingular elements (VOP formulation) ", The Numerical Solution of ODE's, Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, (1974) 183-206
- [8] - SHAMPINE, L.F. and GORDON, M.K.: "Computer solution of ODE for the IVP ", W.H. Freeman and Company, San Francisco, (1975)

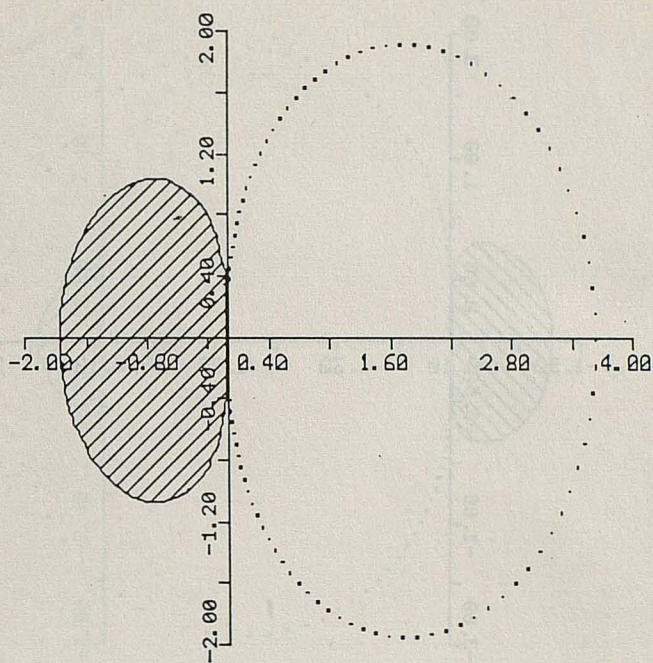




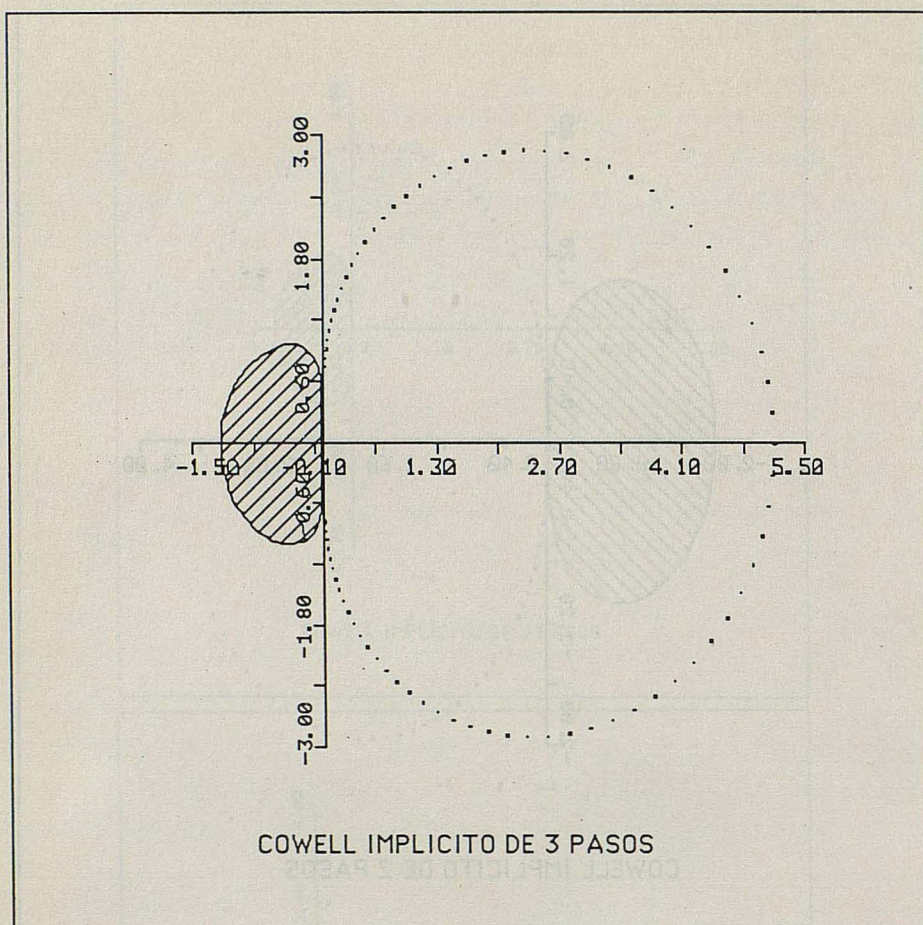
COWELL IMPLICITO DE 3 PASOS

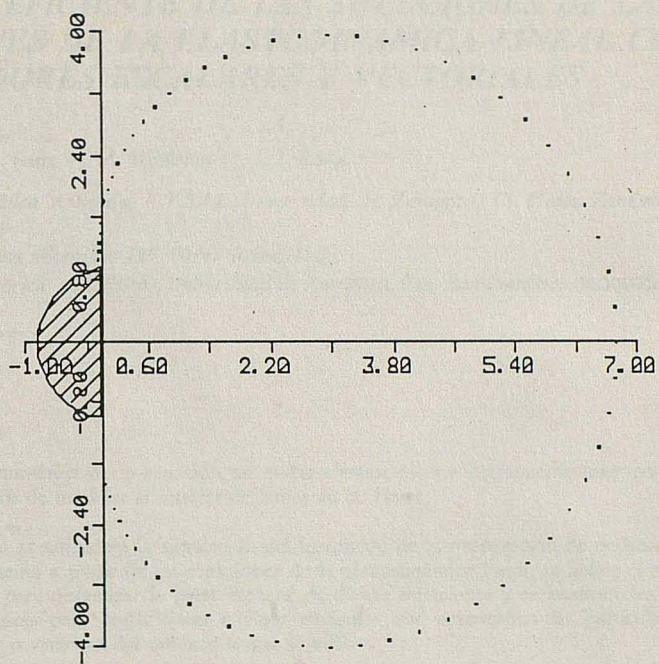


COWELL IMPLICITO DE 4 PASOS



COWELL IMPLICITO DE 2 PASOS





COWELL IMPLICITO DE 4 PASOS

CALCULO EFICIENTE DE LAS SOLUCIONES DE LAS ECUACIONES DE LA ELASTODINAMICA LINEAL CON PROCESADORES ESCALARES Y VECTORIALES

F. J. Serón *, F. J. Sanz *, M. Kindelán **, J. I. Badal ***

* Dept. Matemática Aplicada, E.T.S.I.I., Universidad de Zaragoza, C/ María Zambrano 50, 50015 Zaragoza, Spain

** IBM ECSEC, via Giorgione 159, 00147 Rome, Italy

*** Dept. Física Teórica (Geofísica), Universidad de Zaragoza, Pza. San Francisco, 50009 Zaragoza, Spain

La solución numérica de la ecuación de ondas elástica es una herramienta muy potente para los geofísicos encargados de modelar el interior de zonas de la Tierra.

En este trabajo se considera la simulación del fenómeno de la propagación de ondas. Con este fin, se formula el problema a partir de las ecuaciones de la elastodinámica lineal, se aplica el método de los Elementos Finitos para discretizar la parte espacial de dichas ecuaciones y se analizan las características informáticas necesarias para poder hacer códigos eficientes que aprovechen las particularidades de la arquitectura escalar o vectorial del ordenador que se utilice.

Introducción

Los depósitos de hidrocarburos se encuentran en zonas sedimentarias con formaciones porosas. La tarea de la exploración geofísica es localizar dichas zonas y para ello el método mas común es interpretar los datos obtenidos en campañas de prospección sísmica. Los registros sísmicos contienen una gran cantidad de información y su interpretación es bastante subjetiva. Por esta razón, la industria geofísica está muy interesada en el desarrollo y uso de la simulación sísmica mediante ordenador, ya que la simulación del fenómeno facilita la comprensión del comportamiento de la propagación de las ondas sísmicas. Los resultados obtenidos a partir de este tipo de simulaciones numéricas se pueden utilizar para:

Hacer mas objetiva la labor de interpretación de los fenómenos de propagación ocurridos en las áreas de exploración, caracterizadas normalmente por tener entornos geológicos extremadamente complejos.

Generar datos sintéticos a partir de modelos propuestos, con el fin de poderlos comparar con datos reales. De esta forma los geofísicos pueden demostrar la consistencia de la interpretación realizada.

Crear bancos de datos sintéticos que son siempre útiles para la puesta a punto de nuevas técnicas de adquisición de datos en campo o de procesamiento de datos en gabinete.

Aumentar la eficacia de la enseñanza especializada en los fenómenos ondulatorios, ya que los modelos matemáticos asociados a este tipo de fenomenología son complejos y la extrapolación del comportamiento de las ondas a partir de las ecuaciones es normalmente casi imposible. A través de la simulación numérica los fenómenos de propagación se pueden ver realmente en imágenes.

Existen varios métodos para simular la propagación de ondas sísmicas en estructuras complejas; "Ray tracing", es probablemente la técnica mas utilizada, pero no puede reproducir fenómenos debidos a difracciones causadas por fallas o cambios rápidos de curvatura en el frente de la onda ocasionados por los contornos de los obstáculos. Otros métodos mucho mas útiles aunque mas sofisticados y costosos desde el punto de vista del cálculo que hay que realizar son "Diferencias Finitas", "Elementos Finitos" y "Técnicas Pseudospectrales".

En este trabajo se considera el método de los Elementos Finitos debido a la versatilidad que tiene para ajustarse a las características geométricas de cada problema, en particular permite el uso de mallas no uniformes que tengan elementos con diferente tamaño, geometría y orden de aproximación. De esta manera es posible obtener la exactitud deseada en las diferentes regiones del modelo.

Con este fin, se formula el problema de la propagación de ondas a partir de las ecuaciones de la elastodinámica lineal, se aplica el método de los Elementos Finitos para discretizar la parte espacial de dichas ecuaciones y se analizan las características informáticas necesarias para poder hacer códigos eficientes que aprovechen las particularidades de la arquitectura escalar o vectorial del ordenador que se utilice.

Formulación

Consideremos un medio continuo, elástico, lineal, isótropo, y no homogéneo con dominio Ω y contorno Γ . Supongamos que Ω es una región abierta, acotada y conexa de \mathbb{R}^3 , que Γ es de tipo C^1 a trozos, y que Γ se puede descomponer en dos partes Γ_g, Γ_h cada una con medida superficial estrictamente positiva, de manera que

$$\Gamma = \Gamma_g \cup \Gamma_h \quad \phi = \Gamma_g \cap \Gamma_h$$

Si se denota al vector posición como \mathbf{r} , con dominio en Ω , a la variable tiempo como t , con dominio en el intervalo $(0, T)$ con $T > 0 \in \mathbb{R}$, y se introducen los siguientes conjuntos

$$\hat{\Omega} = \Omega \cup \Gamma \quad Q_T = \Omega \times (0, T) \quad \Sigma_T = \Gamma \times (0, T)$$

se puede formular la simulación del fenómeno sísmico como el problema de encontrar una función desplazamiento

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = [u_1(\mathbf{r}, t), u_2(\mathbf{r}, t), u_3(\mathbf{r}, t)] \quad \text{con} \quad u_i : \hat{\Omega} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}; \quad i = 1, 2, 3$$

tal que $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ satisfaga las ecuaciones de la elastodinámica [1]

$$\rho u_{i,tt} = \sigma_{ij,j} + f_i \quad \text{in } Q_T \quad \text{ecuación de movimiento} \quad (1)$$

$$u_i = g_i \quad \text{in } \Sigma_{gT} \quad \text{condición de Dirichlet} \quad (2)$$

$$\sigma_{ij} n_j = h_i \quad \text{in } \Sigma_{hT} \quad \text{condición de Neumann} \quad (3)$$

$$u_i(\mathbf{r}, 0) = u_{oi}(\mathbf{r}) \quad \forall \mathbf{r} \in \Omega \quad \text{condición inicial} \quad (4)$$

$$u_{i,t}(\mathbf{r}, 0) = \dot{u}_{oi}(\mathbf{r}) \quad \forall \mathbf{r} \in \Omega \quad \text{condición inicial} \quad (5)$$

donde

- $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) : Q_T \rightarrow |\mathbb{R}^3$; son las fuerzas internas
 $\mathbf{g}(\mathbf{r}, t) : \Sigma_{gT} \rightarrow |\mathbb{R}^3$; son los desplazamientos en el contorno Γ_g
 $\mathbf{h}(\mathbf{r}, t) : \Sigma_{hT} \rightarrow |\mathbb{R}^3$; son las tensiones en el contorno Γ_h
 $\rho(\mathbf{r}) : \Omega \rightarrow |\mathbb{R}$; es la densidad
 $\lambda(\mathbf{r})$ and $\mu(\mathbf{r}) : \Omega \rightarrow |\mathbb{R}$; son los parámetros elásticos de Lamé
 σ es el tensor de tensiones de Cauchy
 ε es el tensor de deformaciones, con componentes

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{(u_{j,i} + u_{i,j})}{2} \quad (6)$$

verificándose que las componentes del tensor de tensiones están relacionadas con las componentes del tensor de deformaciones mediante la ley de Hooke

$$\sigma_{ij} = \lambda (\operatorname{div} \mathbf{u}) \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} \quad (7)$$

Las ecuaciones (1-7) son el modelo matemático de la evolución en el tiempo del campo de desplazamientos de un medio elástico, lineal, no homogéneo e isótropo, cuando está sometido a una densidad volumétrica de fuerzas \mathbf{f} y a condiciones de contorno de tipo Dirichlet y de tipo Neumann.

Suponiendo que la solución \mathbf{u} es suficientemente regular, se puede establecer una formulación variacional de las ecuaciones (1-7). Con este fin se introducen los siguientes espacios funcionales:

$L^2(\Omega)$ espacio de Sobolev de las funciones de cuadrado integrable, según la medida de Lebesgue, es decir,

$$L^2(\Omega) = \left\{ f \mid \int |f(\mathbf{r})|^2 d\Omega < +\infty \right\}$$

con el correspondiente producto escalar y norma

$$(f, g)_{0,\Omega} = \int f(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}) d\Omega \quad (8)$$

$$\|f\|_{0,\Omega} = (f, f)_{0,\Omega}^{1/2} \quad (9)$$

$H^1(\Omega)$ espacio de Sobolev de orden 1, es decir,

$$H^1(\Omega) = \left\{ f \in L^2(\Omega) ; \frac{\partial f}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, 2, 3 \right\}$$

con el correspondiente producto escalar y norma

$$(f, g)_{1,\Omega} = \int \left(f(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial x_i} \right) d\Omega \quad (10)$$

$$\|f\|_{1,\Omega} = (f, f)_{1,\Omega}^{1/2} \quad (11)$$

$C^m(0, T; X)$, $0 < T < +\infty$ espacio de las funciones continuas m -veces diferenciables en $[0, T]$. Si X es un espacio de Banach con norma $\|\cdot\|_X$, entonces $C^m(0, T; X)$ es también un espacio de Banach para la norma

$$\|f\|_{C^m(0, T; X)} = \max_{0 \leq i \leq m} \left[\sup_{0 \leq t \leq T} \left\| \frac{d^i f}{dt^i}(t) \right\|_X \right] \quad (12)$$

S espacio de funciones donde se encuentra la solución del problema

$$S = \left\{ u(r, t) \mid u_i(r, t) \in C^m(0, T; H^1(\Omega)), u_i(r, t) = g_i(r, t) \quad \forall r \in \Gamma_g \right\}$$

V espacio de las funciones peso

$$V = \left\{ w(r) \mid w_i(r) \in H^1(\Omega), w_i(r) = 0 \quad \forall r \in \Gamma_g \right\}$$

Con estas definiciones se puede establecer una formulación variacional del problema, utilizando métodos clásicos tal y como se describe en el Apéndice I. Con lo cual el problema queda reducido a:

Dados f, g, h, u_0, \dot{u}_0 , encontrar una función $u \in S$ tal que para todo $w \in V$ se verifique que

$$\frac{d^2}{dt^2} (w, \rho u)_{0, \Omega} + a(w, u) = (w, h)_{0, \Gamma} + (w, f)_{0, \Omega} \quad (13)$$

$$u(0) = u_0 \quad (14)$$

$$\dot{u}(0) = \dot{u}_0 \quad (15)$$

donde $\frac{d^2}{dt^2}$ se debe entender en el sentido de las distribuciones sobre $(0, T)$

$$(w, \rho u)_{0, \Omega} = \sum_{i=1}^3 \int \rho u_i w_i d\Omega \quad (\text{Forma bilineal, simétrica continua}) \quad (16)$$

$$a(w, u) = \sum_{i,j=1}^3 \int \sigma_{ij}(u) \varepsilon_{ij}(w) d\Omega \quad (\text{Forma bilineal, simétrica continua}) \quad (17)$$

$$(w, h)_{0, \Gamma} = \sum_{i=1}^3 \int h_i w_i d\Gamma_h \quad (\text{Forma lineal continua}) \quad (18)$$

$$(w, f)_{0, \Omega} = \sum_{i=1}^3 \int f_i w_i d\Omega \quad (\text{Forma lineal continua}) \quad (19)$$

La solución de (13-15) existe si se verifican las siguientes condiciones [2]

$$\rho(r) \geq \rho_0 > 0, \quad \rho \in L^\infty(\Omega) \quad \lambda(r) \geq \lambda_0 > 0, \quad \lambda \in L^\infty(\Omega) \quad \mu(r) \geq \mu_0 > 0, \quad \mu \in L^\infty(\Omega)$$

donde $L^\infty(\Omega)$ es el espacio de las funciones esencialmente acotadas, y

$$u_0 \in [H^1(\Omega)]^3, \quad \dot{u}_0 \in [L^2(\Omega)]^3, \quad f \in [L^2(Q_T)]^3, \quad h \in [L^2(\Sigma_T)]^3, \quad g \in [L^2(\Sigma_T)]^3.$$

Esta solución existe ya que se puede demostrar que $a(\cdot, \cdot)$ es V -elíptica (desigualdad de Korn [3]) y que ambas formulaciones son equivalentes (Teorema de representación de Ritz [4]).

Método de los Elementos Finitos

El método de los Elementos Finitos sirve para obtener soluciones aproximadas de problemas formulados variacionalmente [5]. Geométricamente este método discretiza el dominio Ω subdividiéndolo en un conjunto de subdominios Ω_i . En principio el número de puntos de contacto entre dos subdominios vecinos es infinito. Posteriormente se discretiza cada subdominio suponiendo que la conexión entre ellos viene dada por un número discreto de puntos denominados "nodos de contorno". A los subdominios discretizados Ω_i se les denomina "elementos finitos" y se denotarán como K_i .

Para que la discretización mediante elementos finitos sea correcta se deben verificar las siguientes condiciones:

- $\hat{\Omega} = \bigcup_{i=1}^n K_i$ n = Número total de elementos.
- K_i cerrado y con interior no vacío ($\overset{\circ}{K}_i$).
- $\overset{\circ}{K}_i \cap \overset{\circ}{K}_j = \emptyset$.
- ∂K_i = contorno de K_i , continuo y Lipschitz.

Desde el punto de vista matemático, el método aproxima la parte espacial del espacio funcional de dimensión infinita S , mediante un subespacio S^h que tiene dimensión finita, η , igual al número de nodos. La base del espacio S^h está formada por funciones

$$N_i: \hat{\Omega} \rightarrow \mathbb{R} \quad i = 1, 2, \dots, \eta \quad \eta = \text{Número total de nodos.}$$

que se caracterizan por tener un soporte local, es decir, el soporte de la función $N_i(\mathbf{r})$ está formado por los elementos a los que pertenece el nudo i . Además, la función $N_i(\mathbf{r})$ verifica $N_i(\mathbf{r}_j) = \delta_{ij}$.

Si $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \in S$ representa la solución del problema, el método de los Elementos Finitos proporciona una solución aproximada $\mathbf{u}^h(\mathbf{r}, t) \in S^h$ dada por

$$u_i^h(\mathbf{r}, t) = \sum_{j=1}^{\eta} N_j(\mathbf{r}) a_{ij}(t) \quad i = 1, 2, 3 \quad (20)$$

es decir, la función $u_i^h(\mathbf{r}, t)$ es una combinación lineal "adecuada" de los desplazamientos de los nodos (a_{ij}) en el instante t .

Se puede decir por lo tanto que el método de los Elementos Finitos permite pasar de un dominio continuo (infinitos puntos) y un espacio S de dimensión infinita, a un dominio discreto (η nodos) y un espacio S^h de dimensión finita. El parámetro h hace referencia a una longitud característica que está asociada al tamaño de la discretización del dominio Ω . La dimensión de S^h es una función de h y si el método es convergente se puede alcanzar la dimensión del espacio S mediante sucesivos refinamientos de la malla, $\lim_{h \rightarrow 0} \eta(h) = \infty$.

Esta técnica de discretización espacial, generalmente llamada formulación semidiscreta de Galerkin, reduce el problema de la elastodinámica (13-15) al siguiente problema [6]:

Dados f, g, h, u_0, \dot{u}_0 , encontrar la función $v^h(r, t) = u^h(r, t) - g^h(r, t)$ con $u^h, v^h, g^h \in S^h$ tal que $\forall w^h \in V^h$ se satisfagan las ecuaciones siguientes

$$\frac{d^2}{dt^2}(w^h, \rho v^h) + a(w^h, v^h) = (w^h, f) + (w^h, h)_\Gamma - \quad (21)$$

$$- \frac{d^2}{dt^2}(w^h, \rho g^h) - a(w^h, g^h)$$

$$v^h(0) = u_0 - g^h(0) \quad (22)$$

$$\dot{v}^h(0) = \dot{u}_0 - \dot{g}^h(0) \quad (23)$$

donde

$$v_i^h(r, t) = \sum_{j \in \eta - \eta_{gi}} N_j(r) d_{ij}(t) \quad (24)$$

$$w_i^h(r) = \sum_{j \in \eta - \eta_{gi}} N_j(r) c_{ij} \quad (25)$$

$$g_i^h(r, t) = \sum_{j \in \eta_{gi}} N_j(r) g_{ij}(t) \quad (26)$$

y η_{gi} es el número de nodos con condiciones de Dirichlet.

A partir de las ecuaciones (16-19) se puede obtener el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, lineales, de segundo orden con coeficientes constantes

$$M \ddot{d} + K d = \hat{f} \quad \forall t \in (0, T) \quad (27)$$

$$d(0) = d_0 \quad (28)$$

$$\dot{d}(0) = \dot{d}_0 \quad (29)$$

donde

M es la matriz de masa K es la matriz de rigidez

\hat{f} es el vector de las cargas d es el vector de los desplazamientos

El Apéndice II muestra como se obtienen en la práctica estas matrices.

La matriz M está determinada por la distribución de densidad en el dominio, la matriz K está determinada por las propiedades elásticas del medio y el vector \hat{f} depende de la fuente utilizada para excitar las ondas y de las condiciones de contorno. Tanto la matriz M como la matriz K son sparse, simétricas y definidas positivas.

Puede demostrarse [2] que el problema semidiscreto (21-23) admite una solución única v^h , y por lo tanto una única $u^h = v^h + g^h$.

Estimaciones del error de la aproximación

Las estimaciones del error cometido en el cálculo de la aproximación a la solución del problema, se suelen expresar en términos de normas de Sobolev. Los principales resultados son los siguientes [7]:

El error $e = u^h(t) - u(t)$, satisface

$$\|e\|_m \leq c h^\alpha \|u\|_r \quad (30)$$

si para cada instante de tiempo t , $u \in [H^r]^3$ y $u^h \in S^h$,

donde

(c) es una constante independiente de u y de h .

(m) está relacionado con el orden de la derivada espacial mas alta que aparece en $a(u, u)$.

$\alpha = \min(k+1-m, r-m)$.

(k) es el grado del polinomio completo que aparece en las funciones base seleccionadas para discretizar.

En el momento en que $k+1$ y r son mayores que m , se obtiene convergencia óptima en la norma H^m . Suponiendo que u es suave, en el sentido de que $u \in [H^{k+1}]^3$, entonces el error satisface

$$\|e\|_m \leq c h^{k+1-m} \|u\|_{k+1} \quad (31)$$

expresión que se conoce con el nombre de "estimación standar del error".

Estimaciones para el error en normas- H^s inferiores, $0 \leq s \leq m$, suelen ser muy interesantes. Suponiendo que $u \in [H^{k+1}]^3$, el resultado principal es

$$\|e\|_s \leq c h^\beta \|u\|_{k+1} \quad (32)$$

donde $\beta = \min(k+1-s, 2(k+1-m))$. En este caso la aproximación por Elementos Finitos es óptima en la norma- H^s , para todo s tal que $0 \leq s \leq m$.

Por ejemplo, sea $k=m=1$. Entonces

$$\|e\|_0 \leq c h^2 \|u\|_2 \quad \|e\|_1 \leq c h \|u\|_2$$

La primera relación da la velocidad de convergencia para los "desplazamientos" y la segunda para los "gradientes de los desplazamientos" (i.e., deformaciones o tensiones) en un instante de tiempo (t).

Un análisis similar [2] muestra que si $u \in C^2(0, T; H^{k+1})$ entonces

$$\|u^h(t) - u(t)\|_{1,\Omega} + \left\| \frac{d}{dt} (u^h(t) - u(t)) \right\|_{0,\Omega} = \quad (33)$$

$$O\{\|u_{0,h}(t) - u_0(t)\|_{1,\Omega} + \|\dot{u}_{0,h}(t) - \dot{u}_0(t)\|_{0,\Omega} + h^k\}$$

ecuación que muestra que el error cometido en el cálculo de los desplazamientos y de las velocidades es función de la aproximación matemática (h^k) y de la aproximación de las condiciones iniciales.

La esencia del criterio de convergencia es que cuanto mas se refina la malla, mas se aproxima u^h a u . Para poder establecer el criterio de convergencia es necesario [7] que en cada una de las mallas que se obtiene al ir variando h , se verifique la condición geométrica $\sigma \leq \sigma_0 \forall S^h$ cuando $h \rightarrow 0$.

Siendo

- h_e = diámetro de K_e .
- ρ_e = diámetro de la esfera inscrita en K_e .
- $h = \max_{1 \leq e \leq n} (h_e)$.
- $\rho = \max_{1 \leq e \leq n} (\rho_e)$.
- $\sigma = \frac{h}{\rho}$.

Necesidades de almacenamiento

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, lineales, de segundo orden, con coeficientes constantes obtenido en (27-29) se debe de integrar a lo largo del intervalo $(0, T)$ discretizando la variable tiempo como $t_n = n \Delta t$ $0 \leq n \leq N$ donde $\Delta t = T/N$. La solución $d(t_n)$ vendrá representada por d_n .

Existen muchos esquemas de integración en el tiempo, entre los que destacan el método de Houbolt [8] el método de Wilson [9] y los métodos de la familia Newmark [10], cuyo análisis está fuera del objetivo de este trabajo, pero la mayoría de estos esquemas de integración conducen a la resolución en cada paso de tiempo (n) de un sistema de ecuaciones algebraicas cuya matriz de coeficientes es sparse, simétrica, bien condicionada y definida positiva.

$$A d_n = b \quad (34)$$

Los sistemas que se obtienen cuando se resuelven problemas de propagación de ondas en estructuras reales son de un orden comprendido entre 10^5 y 10^6 ecuaciones, y su matriz de coeficientes suele tener entre 10 y 30 elementos distintos de cero por fila.

La estructura de la dispersión de los elementos distintos de cero en la matriz A , depende de como se malla el dominio físico que se desea estudiar. Un dominio regular se puede mallar de manera sencilla, en cuyo caso las incógnitas se pueden ordenar de manera que los elementos distintos de cero de la matriz formen una estructura regular (ver Figuras 1 y 2). Cuando el dominio es irregular es necesario usar estructuras de mallas mas complicadas, en cuyo caso los elementos distintos de cero de la matriz se dispersan (ver Figuras 3 y 4). En el Apéndice III se muestran las formas mas comunes de almacenar los elementos de una matriz sparse, en la Figura 5 se muestran los esquemas de representación matricial "compressed diagonal" y "compressed matrix" para las mallas mostradas en las Figuras 1 y 3 respectivamente. y en la Tabla I se muestran las necesidades de almacenamiento para la matriz A , correspondiente a una malla regular con condiciones de contorno y dos grados de libertad por nudo, para tres tamaños de malla. Se puede observar que "row-wise" es el esquema mas eficiente seguido por "compressed diagonal", "compressed matrix" y en último lugar "skyline" con mucha diferencia con respecto a los demás esquemas. Sin embargo tal y como se puede observar en la Figura 5, en el caso de mallas irregulares la representación "compressed diagonal" se deteriora mientras que la representación "compressed matrix" mantiene su eficiencia.

Table I. Necesidades de almacenamiento en K-palabras

Method	63x63	127x127	257x257
Real	7938 ²	32258 ²	132098 ²
Skyline	934.2	7922	66781
Row-wise	70.4	296.2	1234
Compressed-Matrix	143.7	598.5	2481
Compressed-Diagonal	83.2	346.5	1436

El tipo de sistemas mostrado en (34) se puede resolver utilizando métodos directos o métodos iterativos. Los métodos directos se basan en la eliminación Gaussiana y han sido muy utilizados para resolver sistemas dinámicos pequeños proporcionando siempre resultados satisfactorios. Pero el motivo por el que se descartan estos métodos en este trabajo, es que cuando los sistemas son grandes su efectividad decrece debido principalmente a la gran cantidad de elementos nulos que se transforman en no nulos durante la descomposición de la matriz, efecto conocido con el nombre de "fill-in", este fenómeno provoca la necesidad de tener que disponer de una cantidad de almacenamiento inalcanzable. Los métodos iterativos no generan el fenómeno de "fill-in" y por lo tanto necesitan mucha menos cantidad de almacenamiento. Además si el número de iteraciones necesarias para resolver el sistema no es grande, los métodos iterativos tienen un coste computacional menor ya que solo operan con los elementos que son diferentes de cero.

Producto matriz-vector

Desde el punto de vista de los cálculos que hay que realizar para resolver un sistema lineal de ecuaciones mediante métodos iterativos, la operación producto de una matriz por un vector es la mas importante, ya que suele emplear normalmente mas del 50% del tiempo necesario para realizar cada iteración. Ahora bien el coste de este producto viene afectado significativamente por el esquema de almacenamiento utilizado y por el tipo de Unidad Central de Proceso empleado.

En la tabla II se muestra el trozo de programa encargado de realizar el producto (matriz por vector) cuando se utiliza el esquema de almacenamiento "row-wise" (ver la notación en el Apéndice III).

Tabla II.

	DO 20 I=1, M
	ACC = 0.D0
	DO 10 J=IA(I), IA(I+1)-1
	ACC = ACC + D(JA(J)) * AR(J)
10	CONTINUE
	Y(I) = ACC
20	CONTINUE

Obsérvese que los elementos de los vectores **AR** y **JA** son seleccionados de manera secuencial, en cambio los elementos de **D** se seleccionan de manera aleatoria según la dirección dada por **JA**. Si se utiliza un procesador escalar, este esquema de almacenamiento es muy eficiente.

En la tabla III se muestra el trozo de programa encargado de realizar el producto (matriz por vector) cuando se utiliza el esquema de almacenamiento "compressed matrix" (ver la notación en el Apéndice III).

Tabla III.

```

DO 20 I=1, M
  ACC = 0.D0
  DO 10 J=1, K
    ACC = ACC + D( KA(I,J) ) * AC(I,J)
10  CONTINUE
  Y(I) = ACC
20  CONTINUE

```

Obsérvese que los elementos de los vectores **AC** y **KA** se van seleccionando de manera secuencial, en cambio los elementos de **D** se seleccionan aleatoriamente según la dirección dada por **KA**.

En un procesador escalar este algoritmo no es óptimo ya que si algunas filas tienen menos de (k) elementos, se realizan muchas multiplicaciones por cero. Un procesador vectorial puede vectorializar el interior del bucle 20 utilizando instrucciones de tipo "gather-scatter" [11], para recoger los elementos del vector **D** que son necesarios para realizar el producto.

En la tabla IV se muestra el trozo de programa encargado de realizar el producto (matriz por vector) cuando se utiliza el esquema de almacenamiento "compressed diagonal" (ver la notación en el Apéndice III).

Tabla IV.

```

DO 10 I=1, M
  Y(I)=0.D0
10  CONTINUE
DO 30 L=1, ND
  K = LA(L)
  N1 = MAX(1,1-K)
  N2 = MIN(N,N-K)
  DO 20 I=N1,N2
    Y(I) = Y(I) + D(K+1) * AD(I,L)
20  CONTINUE
30  CONTINUE

```


Obsérvese que con este algoritmo todos los elementos de los vectores involucrados en las operaciones se seleccionan de forma secuencial, mientras que en el caso de "compressed matrix" era necesario realizar operaciones de tipo "gather-scatter" con el vector D .

Este esquema de almacenamiento es mas eficiente que la representación anterior cuando se utilizan procesadores vectoriales, debido a que no necesita realizar ningún tipo de accesos aleatorios. Ahora bien, este esquema solo es utilizable si la matriz tiene una clara estructura en diagonales que solo se puede obtener con mallas regulares. En cualquier otro caso se realizan una gran cantidad de multiplicaciones por cero y su eficiencia disminuye.

Conclusiones

En este trabajo se ha aplicado el método de los Elementos Finitos para discretizar la parte espacial de las ecuaciones de la elastodinámica lineal con objeto de simular la propagación de ondas sísmicas, dando los principales resultados sobre el comportamiento del error cometido en dicha aproximación.

De cara a resolver el sistema de ecuaciones algebraicas que se obtiene en cada instante cuando se integra en el tiempo, se recomiendan los métodos iterativos por motivos de almacenamiento.

Se ha realizado el estudio de los esquemas de almacenamiento de matrices sparse con objeto de seleccionar el mas adecuado en función del tipo de procesador (escalar o vectorial) utilizado. El esquema de almacenamiento de matrices "row-wise" es el más económico y el más adecuado para trabajar con procesadores escalares, pero no vectoriza de forma eficiente. La representación "compressed diagonal" es la mas eficiente para trabajar con procesadores vectoriales, pero solo puede ser utilizada con mallas regulares. El esquema de almacenamiento "compressed matrix" es ligeramente menos eficiente pero puede utilizarse con mallas irregulares que es el caso mas usual cuando se trabaja con elementos finitos.

Referencias

1. Achenbach, J.D., *Wave propagation in elastic solids*, North Holland Publishing Company, The Netherlands, 1975.
2. Raviart, P.A. and Thomas, J.A., *Introduction a l'analyse numerique des equations aux derivees partiales*, Masson, Paris, 1983.
3. Nitsche, J.A., **On Korn's second inequality**, *RAIRO Analyse Numerique*, 15, 237-248, (1981).
4. Strang, G. and Fix, J., *An Analysis of the Finite Element Method*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1973.
5. Nitsche, J.A., **On Korn's second inequality**, *RAIRO Analyse Numerique*, 15, 237-248, (1981).
6. Carey, G. F. and Oden, J.T., *Finite elements. A second course*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.
7. Hughes, T.J.R., *The Finite Element Method*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1987.
8. Ciarlet, P.G., *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, North-Holland Publishing Company, New York, 1978.
9. Houbolt, J.C., **A recurrence matrix solution for the dynamic response of elastic aircraft**, *J. Aer. Sci.*, 17, 540-550, (1950).
10. Wilson, E.L., Farhoomand, I. and Bathe, K.J., **Nonlinear dynamic analysis of complex structures**, *Earthquake Eng. Str. Dyn.*, 1, 241-252, (1973).
11. Newmark, N.M., **A method of computation for structural dynamics**, *Am. Soc. Civil Eng. Mech. Div.*, 85, 67-94, (1959).
12. Tucker, S.G., **The IBM 3090 system: An overview**, *IBM systems Journal*, 25, 1, 4-19, (1986).

Apéndice I

La formulación variacional del problema de la elastodinámica se obtiene de la forma siguiente.

- 1. Se multiplica la ecuación de movimiento (1) por una función $w_i \in V$, se integra en el dominio espacial y se suma para las tres componentes espaciales

$$\sum_{i=1}^3 \int \rho u_{i,tt} w_i d\Omega - \sum_{i=1}^3 \int \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij,j} w_i d\Omega = \sum_{i=1}^3 \int f_i w_i d\Omega \quad (35)$$

- 2. Se aplica la fórmula de Green al segundo término situado a la izquierda de la igualdad

$$- \sum_{i=1}^3 \int \sigma_{ij,j} w_i d\Omega = \sum_{i=1}^3 \int \sigma_{ij} w_{i,j} d\Omega - \sum_{i=1}^3 \int \sigma_{ij} n_j w_i d\Gamma \quad (36)$$

- 3. Como σ_{ij} es un tensor simétrico y $w_{i,j}$ es un tensor no simétrico, entonces

$$\sigma_{ij} w_{i,j} = \sigma_{ij} w_{(i,j)} \quad (37)$$

donde $w_{(i,j)}$ es la parte simétrica de la descomposición euclídea de un tensor de rango dos.

$$w_{(i,j)} = \frac{w_{i,j} + w_{j,i}}{2} \quad (38)$$

entonces

$$\sigma_{ij} w_{i,j} = \sigma_{ij} (u) \varepsilon_{ij} (w) \quad (39)$$

- 4. A partir de las condiciones de contorno dadas en (3) y como $w_i = 0$ en Γ_g (debido a la definición del espacio funcional V), el segundo término del lado derecho de la igualdad (36) se puede escribir como

$$- \sum_{i=1}^3 \int \sigma_{ij} n_j w_i d\Gamma = - \sum_{i=1}^3 \int h_i w_i d\Gamma_h - \sum_{i=1}^3 \int g_i 0 d\Gamma_g \quad (40)$$

Por lo tanto

$$\sum_{i=1}^3 \int \rho u_{i,tt} w_i d\Omega + \sum_{i=1}^3 \int \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\Omega = \sum_{i=1}^3 \int h_i w_i d\Gamma_h + \sum_{i=1}^3 \int f_i w_i d\Omega \quad (41)$$

Apéndice II

La formulación de Galerkin descrita en (21-23) está basada en una aproximación "global" ya que las funciones base y el resto de las magnitudes que aparecen, se considera que están definidas en todo el dominio del problema. Esta descripción es útil a la hora de analizar las propiedades matemáticas del método de los Elementos Finitos. Ahora bien, desde el punto de vista de la implementación práctica del método, es mejor aprovecharse de la ventaja que ofrece el "soporte local" de las funciones base. Para ello se descompone cada una de las funciones base N , en otras funciones N_e , cuyo soporte es un elemento simple.

Con la aproximación global, las ecuaciones (24-26) tienen la forma

$$v_i^h(r, t) = \sum_{j=1}^n N_j(r) d_j(t) \quad \forall r \in \Omega \quad (42)$$

que junto con (16-19) se pueden utilizar para calcular directamente las matrices de masa M y de rigidez K , de dimensión $n \times n$ y el vector de cargas f de dimensión n .

Con la aproximación local, en vez de utilizar la expresión (41) se utiliza

$$[v_i^h(r, t)]_e = \begin{cases} 0 & \forall r \notin \hat{\Omega}_e \\ \sum_{k=1}^l [N_k(r)]_e [d_{ik}(t)]_e & \forall r \in \hat{\Omega}_e \end{cases} \quad (43)$$

l = número de nodos en el elemento.

que junto a las ecuaciones análogas a (16-19) pero extendidas solo al elemento $\hat{\Omega}_e$, sirven para obtener las matrices elementales de masa m_e y de rigidez k_e , de dimensión $l \times l$ y el vector de cargas f_e de dimensión l , que se utilizan para calcular de forma mas eficiente las matrices globales de masa M y de rigidez K , y el vector de cargas f .

Hay que resaltar que:

$$N_{k \text{ local}}(r) = N_{j \text{ global}}(r) \quad \forall r \in \hat{\Omega}_e.$$

- Con la aproximación local, las matrices globales se construyen ensamblando adecuadamente las matrices elementales.

La aproximación local puede hacerse del modo siguiente.

Definiendo

$$\varepsilon_e = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \end{bmatrix} \quad \text{'vector' deformación} \quad \sigma_e = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \end{bmatrix} \quad \text{'vector' tensión} \quad (44)$$

$$L_e = \begin{bmatrix} \partial x & 0 & 0 \\ 0 & \partial y & 0 \\ 0 & 0 & \partial z \\ \partial y & \partial x & 0 \\ 0 & \partial z & \partial y \\ \partial z & 0 & \partial x \end{bmatrix} \quad \text{operador diferencial de deformación} \quad (45)$$

$$D_e = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \quad \text{'tensor' de tensiones} \quad (46)$$

y utilizando notación matricial, las ecuaciones (24,6,7) se pueden expresar como

$$v_e^h(r, t) = N_e d_e \quad (47)$$

$$\varepsilon_e = L_e v_e^h = L_e N_e d_e = B_e d_e \quad (48)$$

$$\sigma_e = D_e \varepsilon_e = D_e B_e d_e \quad (49)$$

Utilizando esta aproximación local, la semidiscretización de la formulación variacional del problema de la elastodinámica conduce a

$$M \ddot{d} + K d = \hat{f} \quad \forall t \in (0, T) \quad (50)$$

$$d(0) = d_0 \quad (51)$$

$$\dot{d}(0) = \dot{d}_0 \quad (52)$$

donde

$$M = \sum_{e=1}^n m_e \quad (53)$$

$$K = \sum_{e=1}^n k_e \quad (54)$$

$$\hat{f} = \sum_{e=1}^n f_e \quad (55)$$

n = Número total de elementos.

y

$$m_e = \rho_e \int N_e^T N_e d\Omega_e \quad (56)$$

$$k_e = \int B_e^T D_e B_e d\Omega_e \quad (57)$$

$$f_e = \int N_e^T f d\Omega_e + \int N_e^T h d\Gamma_h - k_e g_e - m_e \ddot{g}_e \quad (58)$$

Apéndice III

REPRESENTACION DE MATRICES SPARSE

Una matriz sparse es una matriz que tiene "pocos" elementos diferentes de cero. Consideremos la siguiente matriz simétrica A como ejemplo de matriz sparse.

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 7 & 0 & 4 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

Las cuatro formas mas comunes de almacenar esta información son

- Por linea de cielo "(Skyline)".
- Por filas "(Row-wise)".
- Comprimida "(Compressed matrix)".
- Por diagonales "(Compressed Diagonal)".

LINEA DE CIELO (SYLINE).

Si la matriz A es simétrica y sparse, con esta representación se almacenan todos los elementos situados desde el primer elemento distinto de cero de cada columna hasta la diagonal principal.

La matriz sparse, $A(n \times n)$, almacenada mediante esta representación emplea dos vectores, un vector real AR y un vector entero IA.

- El vector real AR contiene los elementos de A, almacenados por columnas desde la diagonal hasta la linea de cielo.

- Los elementos del vector IA, son punteros que indican la posición de los elementos de la diagonal de A en AR.

Ejemplo.

$$AR = [4, 4, 4, 0, 7, 4, 0, 2, 4, 0, 4, 4, 0, 1]$$

$$IA = [1, 2, 3, \quad 6, \quad 9, \quad 12]$$

FILAS (ROW-WISE).

Si la matriz A es simétrica y sparse, con esta representación solo se almacenan los elementos distintos de cero de la parte triangular superior y de la diagonal principal de la matriz A.

La matriz sparse, $A(n \times n)$, almacenada mediante esta representación utiliza un vector real AR y dos vectores enteros JA, IA.

- El vector real AR contiene los elementos distintos de cero de A, almacenados por filas en localizaciones contiguas de memoria.

- Los elementos del vector entero JA, son punteros que indican cual es la columna de los correspondientes elementos de AR.

- Los elementos del vector entero IA, de longitud $(n + 1)$, son punteros que indican en que lugar comienza cada una de las filas de A en los vectores AR y JA.

Ejemplo.

$$AR = [4, 7, 4, 2, 4, 4, 4, 1, 4, 4]$$

$$JA = [1, 3, 2, 4, 3, 5, 4, 6, 5, 6]$$

$$IA = [1, 3, 5, 7, 8, 9]$$

COMPRESIDA (COMPRESSED MATRIX).

La matriz $A (n \times n)$ almacenada mediante esta representación utiliza dos matrices rectangulares, AC y KA de (n) filas y (k) columnas, siendo (k) el máximo número de elementos distintos de cero por fila de A.

- Cada fila de la matriz real AC contiene los elementos distintos de cero de la correspondiente fila de A.

- Si una fila de A tiene un número de elementos menor que (k) , la correspondiente fila de AC se debe completar con ceros hasta alcanzar la longitud (k) .

- Los elementos del vector entero KA, son punteros que indican cual es la columna de los correspondientes elementos de AC.

- Si el elemento correspondiente de AC es cero, se puede usar cualquier indice comprendido en el rango $1, \dots, n$.

Las matrices sparse simétricas emplean la misma técnica de almacenamiento que las matrices sparse no simétricas. Es decir, todos los elementos distintos de cero de la matriz simétrica se deben almacenar en la matriz AC, no solo los elementos de la parte triangular superior y diagonal principal.

Ejemplo.

$$AC = \begin{bmatrix} 4 & 7 & 0 \\ 4 & 2 & 0 \\ 4 & 7 & 4 \\ 4 & 2 & 1 \\ 4 & 4 & 0 \\ 4 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad KA = \begin{bmatrix} 1 & 3 & * \\ 2 & 4 & * \\ 3 & 1 & 5 \\ 4 & 2 & 6 \\ 5 & 3 & * \\ 6 & 4 & * \end{bmatrix}$$

DIAGONALES (COMPRESSED DIAGONAL).

Si la matriz A es sparse y simétrica, con esta representación, se almacenan todas las diagonales de la parte triangular superior y de la diagonal principal de A , que tengan al menos un elemento distinto de cero.

La matriz sparse, $A (n \times n)$ con nd diagonales con elementos distintos de cero, cuando se almacena mediante esta representación emplea una matriz real rectangular AD y un vector entero LA .

- AD con (n) filas y (nd) columnas, contiene las diagonales de A .
- Las diagonales se completan con (k) ceros, siendo (k) el número de la diagonal.
- El número de una diagonal se obtiene restando el índice de fila del índice de columna de cualquier elemento perteneciente a dicha diagonal.
- Los elementos del vector LA de longitud nd , contienen los números de las diagonales de la matriz A que se han almacenado en la matriz AD .

Ejemplo.

$$AD = \begin{bmatrix} 4 & 7 \\ 4 & 2 \\ 4 & 4 \\ 4 & 1 \\ 4 & 0 \\ 4 & 0 \end{bmatrix} \quad LA = [0, 2]$$

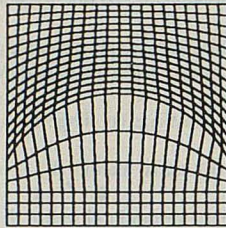


Figure 1: Malla regular.

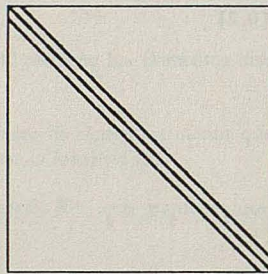


Figure 2: Estructura de la matriz correspondiente a la malla regular.

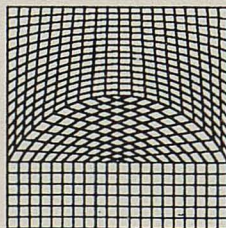
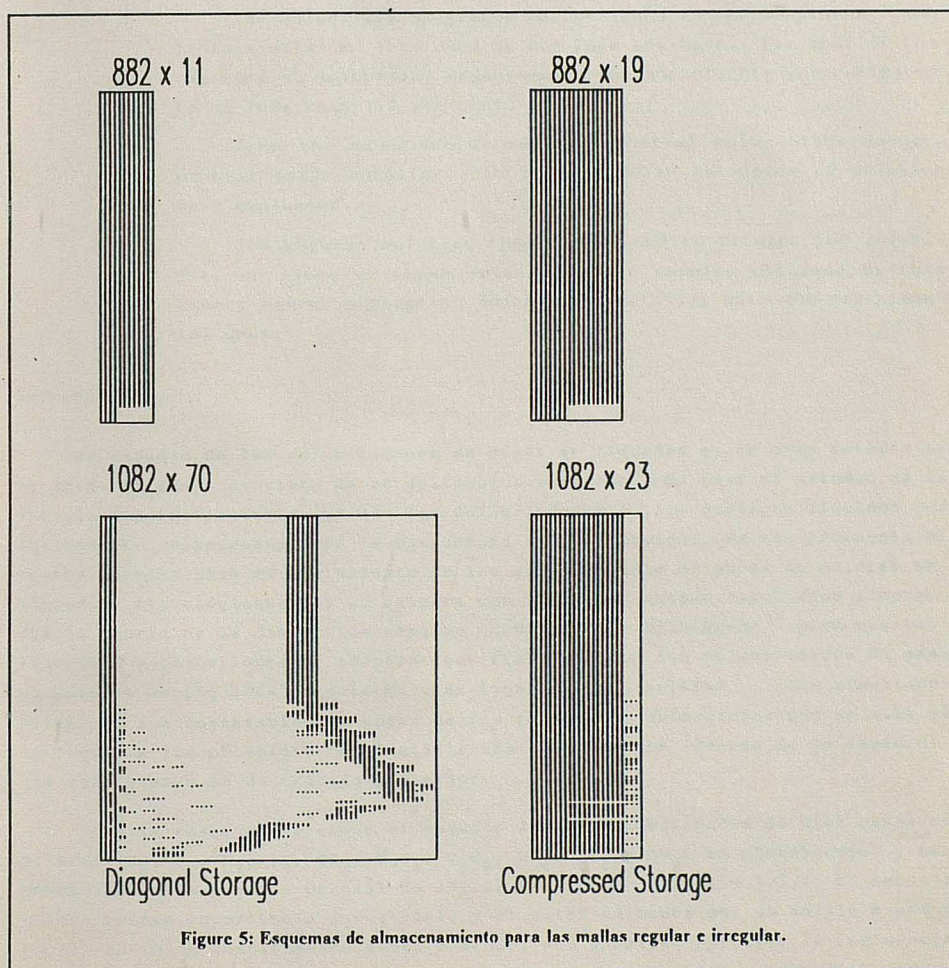
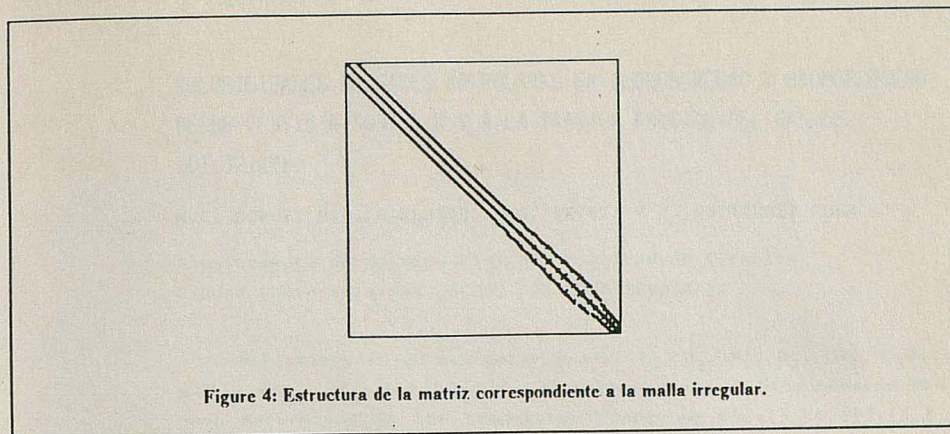


Figure 3: Malla irregular.



SOLUBILIDADES DE GASES NO POLARES EN CLOROBENCENO Y BROMOBENCENO DESDE 263,15 A 303,15 K Y A LA PRESION PARCIAL DEL GAS DE 101,32 kPa.

M.C. LÓPEZ, M.A. GALLARDO, J.S. URIETA Y C. GUTIÉRREZ LOSA

Departamento de Química Física. Facultad de Ciencias.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

Solubility of 10 non polar gases (H_2 , D_2 , N_2 , O_2 , CH_4 , C_2H_4 , C_2H_6 , CF_4 , SF_6 and CO_2) in chlorobenzene and bromobenzene has been determined in the temperature range of 263.15 to 303.15 K, at 101.32 kPa partial pressure of gas.

The solubility apparatus was designed in our laboratory, and it is similar to that used by Ben Naim and Baer. For most of the reported x_2 solubility measurements the uncertainty was estimated to be less than 1.0 per cent.

From the experimental results, partial molar Gibbs energy, partial molar enthalpy, and partial molar entropies of solution were evaluated.

The regular solution theory was used to predict the solubility of gases in these solvents. The results obtained by this theory agree, generally, quite satisfactorily with the experimental ones.

113

INTRODUCCION

El estudio de las solubilidades de gases en líquidos es de gran interés tanto desde el punto de vista de su aplicación práctica como para el estudio de las fuerzas intermoleculares, ya que las solubilidades de los gases en líquidos están íntimamente relacionadas con la estructura de los líquidos. Se han propuesto distintas teorías para el tratamiento de las solubilidades de gases no polares en líquidos. Cronológicamente, la primera con la que se obtuvo resultados aceptables fué la teoría de la disolución regular, deducida por Hildebrand¹ para mezclas líquidas, y posteriormente adaptada por Prausnitz² a las solubilidades de gases no polares en líquidos no polares y en líquidos poco polares³. Los resultados obtenidos son comparables, a pesar de las grandes aproximaciones que en ella se incluyen, a los obtenidos con tratamientos más modernos (Teoría de la Cavidad) que aplicaremos en un trabajo posterior.

En este trabajo aportamos el estudio de las solubilidades de diez gases no polares (H_2 , D_2 , N_2 , O_2 , CH_4 , C_2H_4 , C_2H_6 , CF_4 , SF_6 y CO_2) en clorobenceno y bromobenceno, a la presión parcial de 101,32 kPa, entre 263,15 y 303,15 K. Ambos líquidos poseen importancia industrial, y al estar formados por un anillo bencénico con un único sustituyente, cloro o bromo, nos permiten apreciar la influencia de la presencia del halógeno y de la naturaleza de éste en las solubilidades.

EXPERIMENTAL

Las medidas de solubilidad se han realizado por un método físico de saturación siguiendo una técnica experimental puesta a punto en este Departamento, cuya descripción se detalla en un trabajo anterior⁴. Los líquidos utilizados fueron: clorobenceno Merck, pureza mayor 99,5%, y bromobenceno Fluka, puriss, riqueza mayor 99,5%; éstas han sido contrastadas por cromatografía G-L y mediante las medidas del índice de refracción; los valores obtenidos para éste a 293,15 K fueron: 1,5241 para el clorobenceno y 1,5597 para el bromobenceno, siendo los valores de la literatura⁵ 1,5237 y 1,5594 respectivamente. Los gases utilizados fueron productos de alta pureza, suministrados por la firma S.E.O. a excepción del CF₄ que procedía de la firma J.T. Baker. Su grado de pureza es: H₂ (99,999%), D₂ (99,4%), N₂ (99,998%), O₂ (99,98%), CH₄ (99%), C₂H₄ (99,9%), C₂H₆ (99,0%), CF₄ (99%), SF₆ (99,5%) y CO₂ (99,998%).

En la tabla I se consignan las solubilidades experimentales obtenidas a las distintas temperaturas de trabajo así como los parámetros que se obtienen de ajustar estas solubilidades obtenidas a la ecuación

$$\ln x_2 = a + b/T + c \ln T \quad (1)$$

para el clorobenceno, y en la tabla 2, se presentan estas mismas magnitudes para el bromobenceno. Las imprecisiones para las medidas de solubilidades se estiman menores del 1% para casi todos los casos. X₂ representa la fracción molar del soluto en la disolución y T la temperatura absoluta.

Tabla 1: Solubilidades de los gases expresadas como x₂ · 10⁴, en clorobenceno a distintas temperaturas, y parámetros a, b y c obtenidos al ajustar estos valores con la ecuación 1.

Gases	Temperatura/ K					Parámetros		
	263,15	273,15	283,15	293,15	303,15	a	b	c
H ₂	1,84	2,01	2,19	2,37	2,55	-9,1387	-525,6594	0,4550
D ₂	1,97	2,11	2,30	2,47	2,65	-16,9173	-143,8459	1,6022
N ₂	3,77	3,89	4,03	4,17	4,32	-15,9499	155,9691	1,3682
O ₂	7,70	7,72	5,75	7,78	7,80	-7,7692	2,1776	0,1061
CH ₄	23,2	22,1	21,0	20,1	19,2	-2,8723	183,0979	-0,6980
C ₂ H ₄	202	171	146	126,5	110,5	-10,1836	1274,1152	0,2581
C ₂ H ₆	256	213	180	154	135	-21,5401	1830,9258	1,9586
CF ₄	4,48	4,54	4,61	4,68	4,77	-14,7011	191,5581	1,1235
SF ₆	29,5	27,1	25,3	23,7	22,6	-26,6343	1332,1788	2,8250
CO ₂	177	148	124,7	106,0	91,0	-0,2467	950,7321	-1,3279

Tabla 2: Solubilidades de los gases expresadas como $x_2 \cdot 10^4$, en bromobenceno a distintas temperaturas, y parámetros a, b y c obtenidos al ajustar estos valores con la ecuación 1.

Gases	Temperatura/K					Parámetros		
	263,15	273,15	283,15	293,15	303,15	a	b	c
H ₂	1,56	1,72	1,87	2,05	2,24	-17,5806	-226,9756	1,7363
D ₂	1,68	1,84	1,99	2,14	2,30	-4,2375	-712,8634	-0,3131
N ₂	2,70	2,84	2,99	3,13	3,26	-6,7645	-379,8671	-0,0020
O ₂	5,83	5,91	6,01	6,09	6,18	-9,5241	-9,5358	0,3792
CH ₄	18,7	18,0	17,4	16,8	16,2	-5,2601	193,0744	-0,3244
C ₂ H ₄	174	147	126,2	109,4	96,5	-17,9492	1581,0939	1,4158
C ₂ H ₆	213	178	152	131,2	114,6	-14,2913	1476,3312	0,8665
CF ₄	2,66	2,78	2,90	300	3,11	-7,2718	-300,7902	-0,0331
SF ₆	16,7	15,8	15,0	14,32	13,75	-0,0010	59,8394	-1,1881
CO ₂	145	120,3	101,2	85,6	73,3	-3,1678	1093,8344	-0,9371

Para el cálculo de las magnitudes termodinámicas $\Delta \bar{G}^0$, $\Delta \bar{H}^0$, $\Delta \bar{S}^0$ nos referimos a un proceso de disolución que podemos escribir en la forma general⁶:

M (gas, 101 kPa \rightarrow M (solución, hipotética $x_2=1$)

Si suponemos comportamiento ideal para el gas y la validez de las leyes de las disoluciones diluidas, obtenemos las siguientes relaciones para la energía de Gibbs, entalpía y entropía para el proceso de disolución.

$$\Delta \bar{G}^0 = -RT \ln x_2 \text{ (sat)} \quad (2)$$

$$\Delta \bar{H}^0 = RT \left(\partial \ln x_2 \text{ (sat)} / \partial \ln T \right) \quad (3)$$

$$\Delta \bar{S}^0 = R \left\{ \left(\partial \ln x_2 \text{ (sat)} / \partial \ln T \right) + \ln x_2 \text{ (sat)} \right\} \quad (4)$$

La entropía de disolución de Hildebrand representa el cambio de entropía para el proceso:

M (gas, 101 kPa) \rightarrow M (solución, x_2 , $p_2 = 101$ kPa),
el estado de referencia es aquí una disolución de fracción molar diferente para cada gas y cada temperatura

$$\Delta \bar{S}^0 = R \left(\partial \ln x_2 / \partial \ln T \right) \quad (5)$$

En la tabla 3 se consignan los valores de las magnitudes termodinámicas obtenidas mediante las ecuaciones 2, 3, 4 y 5 a partir de las medidas de los valores ajustados para las solubilidades, y de los parámetros a, b y c de la ec. (1).

Tabla 3: Energía de Gibbs, entalpía, entropía y entropía de Hildebrand de disolución de los gases en clorobenceno y bromobenceno a 298,15 K y 101,32 kPa de presión parcial del gas, en kJ mol⁻¹.

Gases	CLOROBENCENO				BROMOBENCENO			
	ΔG°	ΔH°	ΔS°	$\Delta \bar{S}_H$	ΔG°	ΔH°	ΔS°	$\Delta \bar{S}_H$
H ₂	20,60	5,50	-0,051	0,018	20,94	6,19	-0,049	0,021
D ₂	20,50	5,17	-0,051	0,017	20,85	5,15	-0,053	0,017
N ₂	19,25	2,43	-0,056	0,008	19,95	3,15	-0,056	0,011
O ₂	17,74	0,24	-0,059	0,001	18,33	1,02	-0,058	0,003
CH ₄	15,46	-3,25	-0,063	-0,011	15,88	-2,41	-0,061	-0,008
C ₂ H ₄	11,01	-9,95	-0,070	-0,033	11,35	-9,64	-0,070	-0,032
C ₂ H ₆	10,51	-10,37	-0,070	-0,035	10,91	-10,13	-0,070	-0,033
CF ₄	18,98	1,19	-0,060	0,004	20,06	2,58	-0,059	0,009
SF ₆	15,05	4,07	-0,064	-0,014	16,29	-3,44	-0,066	-0,012
CO ₂	11,46	-11,20	-0,076	0,038	11,99	-11,42	-0,078	-0,038

DISCUSION

Prausnitz y Shair³ consideraron que el proceso de disolución de un gas en un líquido se puede desglosar en dos etapas:

i) Condensación isotérmica del gas a la presión parcial de 101.32 kPa hasta un estado líquido hipotético en el que su volumen molar es igual al volumen molar parcial del gas en la disolución. La variación de la energía de Gibbs para este proceso es:

$$\Delta G_2^{(i)} = RT \ln (f_2^1 / f_2^0(101 \text{ kPa})) \quad (6)$$

f_2^1 , es la fugacidad del gas como líquido hipotético y f_2^0 la fugacidad de ese mismo gas a 101.32 kPa.

ii) Disolución del líquido hipotético en el disolvente hasta alcanzar la saturación. La variación de la energía de Gibbs será ahora:

$$\Delta G_2^{(ii)} = \bar{V}_2 (\delta_1 - \delta_2)^2 \phi_1^2 + RT \ln x_2 \quad (7)$$

siendo \bar{V}_2 el volumen molar del soluto en el estado hipotético, δ_1 y δ_2 son los parámetros de solubilidad del disolvente y del gas y ϕ_1 es la fracción molar en volumen del disolvente.

Como el gas está en equilibrio entre la fase gaseosa y la disolución:

$$\Delta G^{(i)} + \Delta G^{(ii)} = 0 \quad (8)$$

y sustituyendo las energías de Gibbs por sus expresiones se obtiene que:

$$-\ln x_2 = \ln (f_2^1 / f_2^0) + \bar{V}_2 (\delta_1 - \delta_2)^2 \phi_1^2 / RT \quad (9)$$

Esta es la ecuación que expresa la solubilidad de un gas en un líquido según la teoría de la disolución regular. Esta solubilidad aparece siempre como característica del disolvente a través de su parámetro de solubilidad y fracción molar en volumen, y del soluto a través de su fugacidad como líquido hipotético, parámetro de solubilidad y volumen molar parcial. Todos estos parámetros deben estar referidos a una temperatura, nosotros hemos considerado 298.15 K.

El parámetro de solubilidad del líquido δ_1 , se puede conocer a través de la expresión de Hildebrand^{7,8}:

$$\delta_1 = \{(\Delta H_{\text{vap.}} - RT) / V_m\}^{1/2} \quad (10)$$

ΔH_{vap} es su entalpía de vaporización y V_m su volumen molar. Los valores obtenidos son: $\delta_1 = 9,56 \text{ (cal cm}^{-3}\text{)}^{1/2}$ y $V_m = 102,25 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ para el clorobenceno y $\delta_1 = 9,77 \text{ (cal cm}^{-3}\text{)}^{1/2}$ y $V_m = 105,51 \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ para el bromobenceno.

Los parámetros de solubilidad de los gases son los calculados por Prausnitz^{3,7} y las fugacidades de los gases como líquidos hipotéticos se han calculado a partir de las gráficas de fugacidad reducida frente a temperatura reducida^{3,7} excepto en los gases fluorados para los que hemos tomado unos valores deducidos de medidas experimentales de solubilidades^{8,9}. Los parámetros de solubilidad de los gases y las fugacidades de los gases como líquidos hipotéticos se consignan en la tabla 4

Tabla 4: Parámetros de solubilidad de los gases, fugacidad de éstos como líquidos hipotéticos y volumen molar parcial de los gases disueltos en clorobenceno y bromobenceno, calculados según la ecuación (11) o tomadas de la bibliografía*

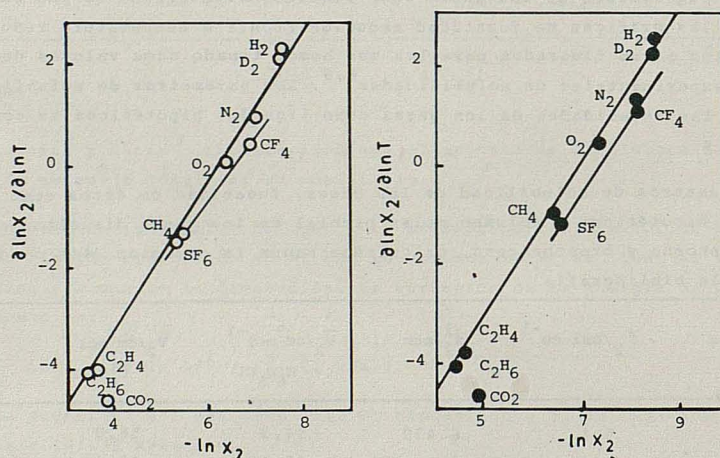
Gases	$\delta_2 / \text{cal cm}^{-3}$	f_2^1 / atm	$\bar{V}_2 / \text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	$\bar{V}_2 / \text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ $\text{C}_6\text{H}_5\text{Br}$
H ₂	5.1	6.439	54.3	56.8
N ₂	2.59	5.371	32.4*	32.4*
O ₂	4.00	5.609	33.0*	33.0*
CH ₄	5.68	5.100	52.0*	52.0*
C ₂ H ₄	6.60	3.807	63.2	64.8
C ₂ H ₆	6.60	3.401	68.2	69.8
CF ₄	4.60	4.489	66.2	80.8
SF ₆	4.85	2.890	84.9	97.0
CO ₂	6.0	3.807	53.9	56.3

El volumen molar parcial de los gases, excepto para N_2 , O_2 y CH_4 que se han tomado de la literatura³) se evalúan mediante la ecuación:

$$\bar{V}_2 = \{-(\Delta - 1) / (\partial P / \partial T)_V\} \cdot R \ln x_2 + V_{2,b} \quad (11)$$

Δ es la pendiente de la recta que resulta del ajuste lineal por el método de mínimos cuadrados de $(\partial \ln x_2 / \partial \ln T)$ frente a $-\ln x_2$, y que se hace separadamente para los gases fluorados. Se excluye el CO_2 , ya que se aparta bastante de esta correlación. En la figura 1 se representan estas relaciones. Los valores de Δ obtenidos son: 1,23 para los gases fluorados y 1,49 para los no fluorados, en clorobenceno y 1,52 y 1,55 en el bromobenceno. El valor de $(\partial P / \partial T)_V$ se obtiene a partir del coeficiente de dilatación isobárico y del de compresibilidad isotérmico⁵ y su valor es $12,89 \text{ atm K}^{-1}$ para clorobenceno y $13,35 \text{ atm K}^{-1}$ para el bromobenceno. Los volúmenes molares parciales obtenidos para los gases en los respectivos disolventes se dan en la tabla 4. En la tabla 5 se consignan las solubilidades de los gases en clorobenceno y bromobenceno, a $298,15 \text{ K}$, obtenidas mediante la ecuación (1) y los parámetros a , b y c de las tablas 1 (clorobenceno) y 2 (bromobenceno), y las solubilidades calculadas al aplicar la teoría de la disolución regular.

Figura 1: Representación gráfica de $\partial \ln x_2 / \partial \ln T$ frente a $-\ln x_2$ para clorobenceno O y bromobenceno ●



Las diferencias existentes entre las solubilidades experimentales y las teóricas no son grandes, sobre todo si se tiene en cuenta las aproximaciones introducidas al efectuar los cálculos del volumen del gas como líquido hipotético y la fugacidad del gas, también como líquido hipotético. La mayor discrepancia se observa para el hexafluoruro de azufre en bromobenceno (43%).

El comportamiento de los gases es análogo en ambos disolventes, siendo las solubilidades en bromociclohexano ligeramente inferiores que en el disolvente clorado. Para el hexafluoruro de azufre destaca el bajo valor experimental que

resulta para su solubilidad en comparación con el teórico.

Al comparar los valores experimentales obtenidos para estos disolventes con los que se obtienen para estos mismos gases con benceno^{10,11,12,13}, se observa que las solubilidades son mayores en este último disolvente (excepto en el caso del CO₂ para el que se presenta un valor intermedio entre el compuesto clorado y el bromado): Es decir, que, en general, la presencia de un sustituyente halógeno hace que disminuya la solubilidad del gas y además esta disminución se acentúa cuando aumenta el tamaño del sustituyente.

Tabla 5: Comparación entre los valores experimentales de las solubilidades (ajustados según la ec. (1)) y los calculados mediante la teoría de la disolución regular para clorobenceno y bromobenceno a la temperatura de 298.15 K.

Gases	clorobenceno		bromobenceno	
	$x_2 \cdot 10^4$ (exp.)	$x_2 \cdot 10^4$ (teo.)	$x_2 \cdot 10^4$ (exp.)	$x_2 \cdot 10^4$ (teo.)
H ₂	2.46	2.58	2.14	1.97
D ₂	2.56	----	2.22	----
N ₂	4.24	3.26	3.19	2.77
O ₂	7.79	6.55	6.14	5.74
CH ₄	19.6	16.3	16.5	14.0
C ₂ H ₄	118	87.2	103	74.0
C ₂ H ₆	144	122	122	102
CF ₄	4.72	6.43	3.06	4.82
SF ₆	23.1	23.1	14.0	20.5
CO ₂	98.1	70.1	79.1	57.6

AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan su agradecimiento a la Comisión Asesora de Investigación Científica y Técnica (Proyecto 1978/82) por su ayuda económica.

BIBLIOGRAFIA

- 1 - J.H. Hildebrand, S.E. Wood, J. Chem. Phys. 12, 1937 (1933)
- 2 - J.M. Prausnitz, AIChE J. 4, 269, (1959)
- 3 - J.M. Prausnitz, F.H. Shair, AIChE J. 7, 602, (1961)
- 4 - J. Carnicer, F. Gibanel, J.S. Urieta, C. Gutiérrez Losa, Rev. Acad. Ciencias Zaragoza, 34 115, (1979)
- 5 - "Handbook of Chemistry and Physics". 59th CRC (Press)
- 6 - R.J. Dack "Techniques of Chemistry" (Solutions and Solubilities), 8, Ed. Weissberger, (1975)
- 7 - J.H. Hildebrand, R.L. Scott, "Solubility of non electrolytes" Dover Pub. inc New York (1964)
- 8 - J.M. Melendo, Memoria de licenciatura Febrero (1981)
- 9 - M.A. Gallardo, J.S. Urieta, C. Gutiérrez Losa, J. Chim. Phys., 80, 621 (1983)
- 10 - J.C. Galdabek, Acta Chem. Scand., 7, 534, 1953
- 11 - J. Boriuti, Sci. Pap. Inst. Phys. Chem. Res. Tokio, 17, 125 (1931)
- 12 - M.W. Cook, D.N. Manson, B.J. Alder, J. Chem. Phys. 26, 748 (1957)
- 13 - G. Archer, J.H. Hildebrand, J. Phys. Chem., 67, 1830, (1963)

SOLUBILIDADES DE LOS GASES NOBLES EN CLOROBENCENO Y BROMOBENCENO ENTRE 263,15 K Y 303,15 K Y A LA PRESION PARCIAL DEL GAS DE 101,32 kPa.

M.C. LÓPEZ, M.A. GALLARDO, J.S. URIETA Y C. GUTIÉRREZ LOSA

Departamento de Química Física. Facultad de Ciencias.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

Solubility measurements of rare gases in chlorobenzene and bromobenzene between 263.15 and 303.15 K and 101.32 kPa partial pressure of gas, are evaluated. Using the scaled particle theory, Lennard-Jones 6,12 pair potential parameters for chlorobenzene and bromobenzene were determined. For this purpose, we have also used the solubilities of other 10 non polar gases whose measurements appear also in this Revista.

Likewise, a method for the correlation and prediction of solubilities and entropies of solution of gases in liquids by means of a factor analysis has been considered; agreement is satisfactory, except for the fluorinated gases and the carbon dioxide.

INTRODUCCION

El estudio termodinámico de las disoluciones es una de las líneas de investigación mas importantes en Química Física. Dentro de este área, el estudio de las disoluciones de gases en líquidos representa un amplio campo de trabajo, ya que las disoluciones están íntimamente relacionadas con la estructura de los líquidos y con las interacciones entre las partículas que constituyen la disolución.

Reiss y col.^{1,2} desarrollaron un tratamiento estadístico de un modelo de esferas rígidas, mediante el cual calcularon el trabajo necesario para introducir una partícula esférica en un fluido que se considerase constituido por partículas rígidas y esféricas. Este cálculo constituye uno de los principales fundamentos de la teoría de la cavidad (Scaled Particle Theory, SPT) que ha sido aplicada al tratamiento de solubilidades de gases en líquidos por Pierotti^{3,4,5}, y que permite deducir, a partir de las medidas experimentales de solubilidades los parámetros de la función de potencial intermolecular de Lennard-Jones 6,12 entre los pares de las moléculas de disolvente. Esta teoría es actualmente la que puede, en forma más general, interpretar y justificar las solubilidades de gases en líquidos:

Otro tipo de tratamiento, que no intenta justificar teóricamente las solubilidades de los gases sino que tiene como objetivo la predicción de éstas y de las entalpías de disolución, es un método propuesto por de Ligny⁶ que se

basa en un tratamiento por análisis factorial de varios datos de solubilidades para extraer de ellos unos parámetros que caractericen a cada gas y a cada disolvente independientemente uno del otro.

Hemos medido las solubilidades de los gases nobles en clorobenceno y bromobenceno a varias temperaturas, y hemos aplicado la teoría de la cavidad y el método del análisis factorial de de Ligny a estas medidas y a las efectuadas con 10 gases no polares (H_2 , D_2 , N_2 , O_2 , CH_4 , C_2H_4 , C_2H_6 , CF_4 , SF_6 y CO_2) en estos disolventes y que han sido publicados en esta misma Revista, en un trabajo anterior⁷. Así podemos contrastar la bondad de la teoría de la cavidad y la utilidad del método del análisis factorial.

EXPERIMENTAL

Los líquidos utilizados son: clorobenceno, Merck y bromobenceno Fluka, sus purezas son superiores en ambos casos a 99,5% y han sido contrastadas por cromatografía G-L⁷ y por medidas del índice de refracción⁷.

Los gases son productos de alta pureza de la firma S.E.O. (a excepción del neon que fue J.T. Baker), He (99.995%), Ne (99.9%), Ar (99.9990%), Kr (99.95%) y Xe (99.995%).

Las medidas de solubilidad se han realizado por un método físico de saturación, siguiendo una técnica puesta a punto en este Departamento⁸. Se estima que la imprecisión con que se obtienen estas medidas es, generalmente, menor del 1%, aunque para He y Ne, en algún caso, podría ser algo inferior.

En la tabla 1 se consignan las solubilidades de los gases a las temperaturas de experimentación: 263,15, 273,15, 283,15, 293,15 y 303,15 K a la presión parcial de 101,32 kPa, expresadas como fracción molar, y los parámetros a, b y c que se obtienen al ajustar las solubilidades a la ecuación:

$$\ln x_2 = a + b/T + c \ln T \quad (1)$$

En la tabla 2, indicamos las magnitudes termodinámicas para el proceso de disolución, calculadas a 298.15 K según las expresiones⁹:

$$\text{Energía de Gibbs: } \Delta \bar{G}^0 = -RT \ln x_2 \text{ (sat)} \quad (2)$$

$$\text{Entalpía: } \Delta \bar{H}^0 = RT (\partial \ln x_2 \text{ (sat)} / \partial \ln T) \quad (3)$$

$$\text{Entropía: } \Delta \bar{S}^0 = R \{ (\partial \ln x_2 \text{ (sat)} / \partial \ln T) + \ln x_2 \text{ (sat)} \} \quad (4)$$

$$\text{Entropía de Hildebrand: } \Delta \bar{S}_H = R (\partial \ln x_2 / \partial \ln T) \quad (5)$$

Tabla 1: Solubilidades de los gases expresadas como $x_2 \cdot 10^4$, en clorobenceno y bromobenceno a distintas temperaturas, y parámetros que resultan de ajustar estas solubilidades como función de la temperatura según la ecuación (1).

Gases	Temperatura/K					Parámetros		
	263,15	273,15	283,15	293,15	303,15	a	b	c
Disolvente: C L O R O B E N C E N O								
He	0,446	0,514	0,594	0,679	0,767	-12,4199	-810,6574	0,9834
Ne	0,669	0,752	0,840	0,947	1,043	-17,0369	-432,6713	1,6269
Ar	8,52	8,53	8,55	8,57	8,57	-7,0521	-11,8735	-0,0052
Kr	33,1	31,2	29,5	28,0	26,6	24,8784	-892,4782	-4,8769
Xe	199	171	148	131	115,4	-9,5541	1143,1617	0,2315
Disolvente: B R O M O B E N C E N O								
He	0,353	0,416	0,488	0,569	0,660	-21,1678	-584,8330	2,3571
Ne	0,494	0,563	0,657	0,753	0,853	-21,4674	-436,2918	2,3691
Ar	6,59	6,64	6,73	6,80	6,87	-9,4002	15,7659	0,3614
Kr	27,5	25,9	24,4	23,2	22,3	-16,8258	818,2865	1,4032
Xe	175	151	131	116,2	103,7	-13,4995	1273,4191	0,8275

Tabla 2: Energía de Gibbs, entalpía, entropía y entropía de Hildebrand para la disolución de los gases nobles en clorobenceno y bromobenceno a 298.15 K y 101.32 kPa de presión parcial del gas, en kJ mol^{-1} .

Gases	CLOROBENCENO				BROMOBENCENO			
	$\Delta \bar{G}^0$	$\Delta \bar{H}^0$	$\Delta \bar{S}^0$	$\Delta \bar{S}_H$	$\Delta \bar{G}^0$	$\Delta \bar{H}^0$	$\Delta \bar{S}^0$	$\Delta \bar{S}_H$
	$\text{kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$							
He	23,64	9,18	-0,049	0,031	24,04	10,71	-0,045	0,036
Ne	22,85	7,63	-0,051	0,025	23,38	9,50	-0,047	0,032
Ar	17,51	0,11	-0,058	0,000	18,07	0,76	-0,058	0,003
Kr	14,63	-4,67	-0,065	-0,016	15,09	-3,33	-0,062	-0,011
Xe	10,91	-8,93	-0,066	-0,030	11,19	-8,54	-0,066	-0,028

Tabla 3: Solubilidades de los gases no polares en clorobenceno y bromobenceno a 298.15 K.

Gases	clorobenceno $x_2 \cdot 10^4$	bromobenceno $x_2 \cdot 10^4$
He	0,722	0,613
Ne	0,989	0,802
Ar	8,57	6,83
Kr	27,3	22,7
Xe	123	110
H ₂	2,46	2,14
D ₂	2,56	2,22
N ₂	4,24	3,19
O ₂	7,79	6,14
CH ₄	19,6	16,5
C ₂ H ₄	118	103
C ₂ H ₆	144	122
CF ₄	4,72	3,06
SF ₆	23,1	14,0
CO ₂	98,1	79,1

Como, normalmente, los cálculos teóricos se refieren a la temperatura de 298.15 K, en la tabla 3 consignamos los valores de las solubilidades que, mediante interpolación, resultan a dicha temperatura para los gases nobles y, además, las de los gases: H₂, D₂, N₂, O₂, CH₄, C₂H₄, C₂H₆, CF₄, SF₆ y CO₂, cuyas medidas experimentales aportamos en un trabajo anterior⁷.

DISCUSION

El modelo de la cavidad, propuesto por Pierotti y desarrollado por Wilhelm y Battino^{10,11} considera que el proceso de disolución de un gas en un líquido se puede desglosar en dos etapas:

La primera, es la creación de la cavidad en el disolvente con el tamaño adecuado para alojar la molécula del gas

La segunda consiste en la introducción en el interior de la cavidad

de la molécula del gas que interacciona con el disolvente. Cuando el gas se halla en equilibrio con el líquido, se tiene que cumplir⁵ que el potencial químico del gas en cada una de las fases sea el mismo.

Considerando la situación de equilibrio y que se cumple la Ley de Henry, y expresando las magnitudes para un mol de sustancia se obtiene que la energía de Gibbs para el proceso de disolución es:

$$\Delta \bar{G}^0 = RT \ln K_H = \bar{G}_c + \bar{G}_i + RT \ln RT/V_1^0 \quad (6)$$

donde K_H es la constante de la ley de Henry, \bar{G}_c es la energía de Gibbs molar parcial necesaria para la creación de la cavidad, \bar{G}_i es la energía de Gibbs molar parcial correspondiente a la interacción de la molécula de gas en la cavidad, R es la constante de los gases, T la temperatura absoluta y V_1^0 el volumen molar del líquido.

La evaluación de \bar{G}_c ha sido llevada a cabo por Reiss y col.^{1,2}, obteniendo una ecuación asintótica de la forma:

$$\bar{G}_c = k_0 + k_1 a_{12} + k_2 a_{12}^2 + k_3 a_{12}^3 \quad (7)$$

en la que a_{12} es el radio de la esfera que excluye los centros de las moléculas de disol-

vente en torno a la del soluto y las constantes k_1 dependen de la densidad, temperatura, presión y diámetro de la esfera rígida. Esta expresión se puede desarrollar en función llamado factor de compacidad, y^{10} :

$$y = \pi a_1^3 / \rho \quad (8)$$

a_1 , es el diámetro de la esfera rígida para el disolvente y ρ es el número de densidad para las moléculas: $\rho = N_A / V_1^0$. Teniendo en cuenta las expresiones para las $k_i^{3,4}$, se obtiene la siguiente ecuación para \bar{G}_c :

$$\bar{G}_c = RT \left\{ 6 \frac{y}{1-y} \left[2 \frac{a_{12}}{a_1} \right]^2 - \frac{a_{12}}{a_1} \right\} + 18 \left(\frac{y}{1-y} \right)^2 \left[\left(\frac{a_{12}}{a_1} \right)^2 - \frac{a_{12}}{a_1} - \frac{1}{4} \right] - \ln(1-y) \quad (9)$$

Para evaluar \bar{G}_i , Pierotti supone que la energía de Gibbs molar parcial para el término de interacción es aproximadamente igual a la energía de interacción molar parcial

$$\bar{G}_i \approx \bar{E}_i \quad (10)$$

La energía de interacción de un gas no polar con un líquido polar, puede expresarse mediante:

$$\epsilon_i = -C_{dis} \sum_p (r_p^{-6} - \sigma_{12}^6 r_p^{-12}) - C_{ind} \sum_p r_p^{-6} \quad (11)$$

r_p son las distancias de los centros de las moléculas de gas y líquido, C_{dis} y C_{ind} son las constantes de las energías de dispersión y de inducción y σ_{12} es la distancia entre una molécula de soluto y una de disolvente a la cual las energías de dispersión y de repulsión son iguales en magnitud. C_{dis} y C_{ind} pueden calcularse mediante las expresiones dadas por Pierotti³.

Para la constante de la energía de dispersión resulta:

$$C_{dis} = 4(\epsilon_1^0 \cdot \epsilon_2^0)^{1/2} \{ (\sigma_1 + \sigma_2)/2 \}^6 = 4 \epsilon_{12}^0 \sigma_{12}^6 \quad (12)$$

donde ϵ_1^0 y ϵ_2^0 son los parámetros de energía y σ_1 y σ_2 los de distancia, para el líquido (1) y para el gas (2).

La constante de inducción se obtiene mediante la expresión:

$$C_{ind} = \mu_1^2 \alpha_2 \quad (13)$$

donde μ_1 es el momento dipolar del líquido y α_2 la polarizabilidad del gas.

La expresión de \bar{G}_i es:^{3,4}

$$\bar{G}_i = \bar{G}_{i \text{ dis}} + \bar{G}_{i \text{ ind}} = -1,333\pi\rho N_A (\mu_1^2 \alpha_2 / \sigma_{12}^3) + 3,555\pi\rho \sigma_{12}^3 (\epsilon_{12}^0 / k) \quad (14)$$

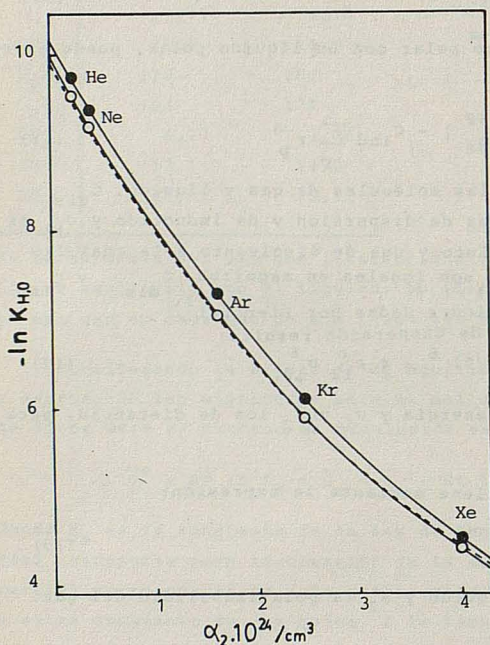
Como los gases nobles son los únicos que cumplen la doble condición de ser esféricos y monoatómicos, al correlacionar el logaritmo de la constante de la ley de Henry con la polarizabilidad del gas y extrapolar a polarizabilidad cero (esfera rígida) se obtiene un valor límite, $K_{H,0}$, que es el valor de la

constante de la Ley de Henry para una esfera rígida en un determinado disolvente. Por otra parte, para determinar el diámetro de esfera rígida de un gas cuya polarizabilidad sea cero, se debe representar el diámetro a_2 frente a la polarizabilidad α_2 y extrapolar a $\alpha_2 = 0$. El resultado así obtenido es 0,225 nm. De lo anterior resulta que:

$$\lim_{\substack{\alpha_2 \rightarrow 0 \\ a_2 \rightarrow 0,255}} \ln K_H = \ln K_{H,0} \quad (15)$$

Los valores de $K_{H,0}$ que hemos hallado son: 9,98 para el clorobenceno y 10,15 para el bromobenceno. En la figura 1 se pueden ver estas representaciones (la línea punteada corresponde al benceno)

Figura 1: Valores experimentales de $\ln K_H$ frente a α_2 para los gases nobles en clorobenceno O, bromobenceno ● y benceno --- a 298.15 K y 101.32 kPa.



Para dichas esferas rígidas la ecuación (6) se transforma en

$$RT \ln K_{H,0} = G_c + RT \ln RT/V_1^0 \quad (16)$$

de modo que conociendo $K_{H,0}$, el volumen molar del líquido, tomando $a_2 = \sigma_2 = 0.255 \text{ nm}$ y sustituyendo \bar{G}_c por su correspondiente expresión (9), se obtiene el diámetro de esfera rígida, a_1 , que asimilamos al parámetro de distancia del potencial de Lennard-Jones, σ_1 , para dos moléculas iguales de disolvente. Los valores obtenidos son: 0,561 nm para el clorobenceno y 0,572 nm para el bromobenceno, que concuerdan bien con los resultados hallados en la bibliografía¹³.

Por otra parte, transformando la ecuación (6), obtenemos la expresión:

$$\begin{aligned} RT \ln K_H - \bar{G}_c - RT \ln (RT/V_1^0) - \\ - 1,333\pi\rho N_A u_1^2 \alpha_2^3 / \sigma_{12}^3 = \\ = -3.555\pi\rho R \sigma_{12}^3 (\epsilon_1^0/k)^{1/2} (\epsilon_2^0/k)^{1/2} \end{aligned} \quad (17)$$

El primer término se obtiene a partir de las medidas experimentales de solubilidades, de \bar{G}_c , $\bar{G}_i \text{ ind}$, $\bar{G}_i \text{ dis}$. \bar{G}_c se puede calcular una vez estimado σ_1 , el momento dipolar está tomado de la bibliografía¹² y se admiten como vá-

lidas para los parámetros mixtos, las reglas de combinación sencillas:

$$\sigma_{12} = (\sigma_1 + \sigma_2)/2 \quad (18)$$

$$\epsilon_{12}^0 = (\epsilon_1^0 \cdot \epsilon_2^0)^{1/2} \quad (19)$$

En la tabla 4, se dan los valores de las energías de Gibbs correspondientes: a la formación de la cavidad \bar{G}_c , de dispersión $\bar{G}_i \text{ disp}$ y de inducción $\bar{G}_i \text{ ind}$ para el clorobenceno y el bromobenceno.

Tabla 4: Contribuciones a las energías de Gibbs de disolución: términos de creación de la cavidad, de inducción y de dispersión en kJ mol^{-1} para clorobenceno y bromobenceno.

Gases	\bar{G}_c	$\bar{G}_i \text{ ind}$	$\bar{G}_i \text{ disp}$	\bar{G}_c	$\bar{G}_i \text{ ind}$	$\bar{G}_i \text{ disp}$
	CLOROBENCENO			BROMOBENCENO		
He	11,61	-0,01	-2,33	12,13	-0,01	-2,40
Ne	12,55	-0,02	-6,02	13,11	-0,02	-6,17
Ar	16,58	-0,06	-13,94	17,34	-0,06	-14,26
Kr	18,45	-0,09	-17,66	19,30	-0,08	-18,04
Xe	20,66	-0,13	-21,94	21,63	-0,12	-22,40
H ₂	13,04	-0,04	-5,60	13,62	-0,03	-5,74
D ₂	13,04	-0,04	-5,78	13,62	-0,03	-5,92
N ₂	18,67	-0,06	-13,37	19,54	-0,06	-13,66
O ₂	16,93	-0,06	-13,78	17,71	-0,06	-14,09
CH ₄	18,67	-0,10	-17,18	19,54	-0,09	-17,56
C ₂ H ₄	21,54	-0,10	-23,38	22,55	-0,09	-17,56
C ₂ H ₆	24,11	-0,12	-26,03	25,24	-0,11	-26,53
CF ₄	26,56	-0,08	-21,31	27,81	-0,07	-21,70
SF ₆	34,75	-0,09	-33,23	36,42	-0,09	-33,65
CO ₂	20,51	-0,08	-20,84	21,46	-0,08	-21,10

Del segundo miembro de la ecuación se desconoce únicamente ϵ_1^0/k , por lo tanto, representando gráficamente el primer miembro de la ecuación (17) frente a $(\epsilon_2^0/k)^{1/2} \sigma_{12}^3$ para todos los gases obtendremos una recta cuya pendiente es: $-3,555\pi R(\epsilon_1^0/k)^{1/2}$. Del valor deducido para esta pendiente podemos obtener así el valor del parámetro de energía ϵ_1^0/k .

En la figura 2 se muestran estas representaciones gráficas para clorobenceno y bromobenceno a 298.15 K. Los valores de los parámetros de energía obtenidos son: 618 K^{-1} para el clorobenceno y 637 K^{-1} para bromobenceno, valores que concuerdan bien con los hallados en la bibliografía¹³ (610 y 616 respectivamente)

Figura 2: Representación gráfica del primer miembro de la ecuación (17) frente a $\sigma_{12}^3(\epsilon_2/k)^{1/2} \cdot 10^{28}$ para los gases, en clorobenceno \circ y bromobenceno \bullet , a 298.15 K

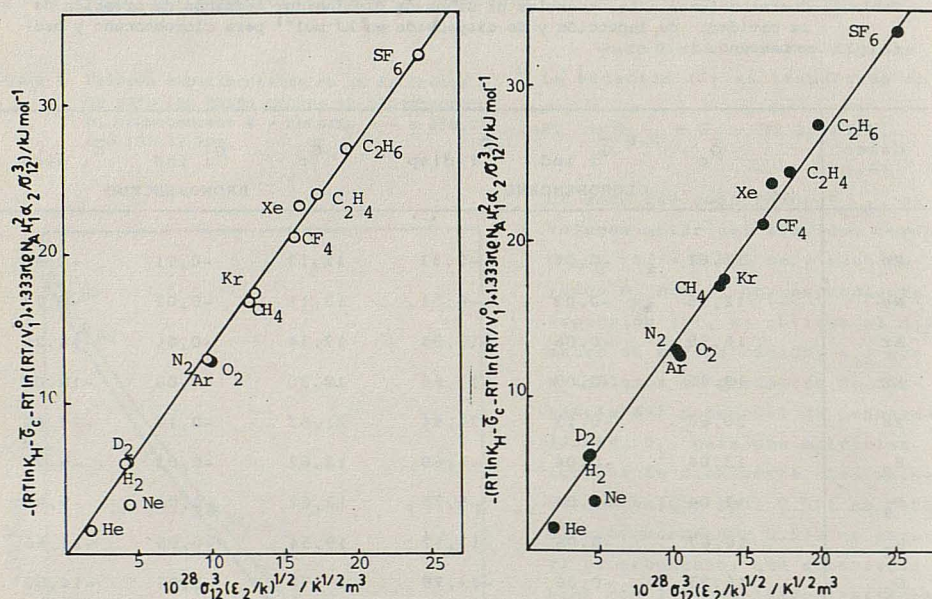


Tabla 5: Valores de las solubilidades de los gases calculadas mediante la teoría de la cavidad, expresadas en fracción molar ($x_2 \cdot 10^4$) a 298.15 K para clorobenceno y bromobenceno.

Gases	CLOROBENCENO	BROMOBENCENO	Gases	CLOROBENCENO	BROMOBENCENO
He	0,996	0,854	O ₂	12,0	10,2
Ne	3,02	2,64	CH ₄	23,8	20,1
Ar	14,8	12,75	C ₂ H ₄	91,4	75,8
Kr	31,4	26,75	C ₂ H ₆	95,5	75,9
Xe	73,8	61,69	CF ₄	5,19	3,76
H ₂	2,11	1,82	SF ₆	22,6	14,6
D ₂	2,27	1,96	CO ₂	46,2	38,4
N ₂	5,04	4,11			

Una vez calculados los parámetros de distancia y energía del clorobenceno y del bromobenceno, se pueden obtener los valores de la energía de Gibbs de disolución mediante la ecuación (6). Para ello se reinvierten los cálculos para \bar{G}_c y \bar{G}_i , ecuaciones (9) y (14), introduciendo en éstas los parámetros de los disolventes junto con los de los gases. Una vez obtenidas las energías de Gibbs para la disolución, podemos deducir de ellas los valores de las solubilidades de los gases, valores que se consignan en la tabla 5

Otro método, mencionado inicialmente, para estimar las solubilidades de los gases en líquidos es el método del análisis factorial de de Ligny. Expresa las solubilidades y las entropías de disolución mediante ecuaciones del tipo:

$$y_{g,l} = \sum_i^n G_i L_i \quad (20)$$

$y_{g,l}$ representa la solubilidad o entropía de disolución y G y L son parámetros ajustables, G depende únicamente de la naturaleza del gas y L de la del disolvente. Hay que elegir el número de términos necesarios para que los restos

$$r_{g,l,n} = y_{g,l} - \sum_i^n G_i L_i \quad (21)$$

sean mínimos.

De Ligny^{6,14}, elige un conjunto de solubilidades de gases en líquidos de los que desconoce el 50% de las combinaciones, habiendo datos desconocidos los parámetros G y L , no pueden calcularse por el método del análisis factorial, ya que para ello es necesario conocer el conjunto completo de los datos, por ello idea una variante de este método, que denomina también método del análisis factorial, y por medio de un proceso iterativo calcula los parámetros G y L que cumplan la condición:

$$\sum_{g,l} (y_{g,l} - \sum_i^n G_i L_i)^2 = \sum_{g,l} r_{g,l,n}^2 \quad (22)$$

eligiendo el número n de términos adecuado.

El aspecto más importante de este cálculo es su capacidad para predecir solubilidades y entropías de disolución, cuando conocemos datos de solubilidades de esos gases con ciertos disolventes y la de esos disolventes con otros gases.

Haciendo un cálculo de desviaciones, ha resultado⁶ que para reproducir las solubilidades, el valor idóneo de n es 2, por lo tanto:

$$\log p/x = G_1 L_1 + G_2 L_2 \quad (23)$$

p es la presión en mm de Hg y x la solubilidad expresada como fracción molar.

En la tabla 6 se consignan las solubilidades, a 298.15 K, que resultan de aplicar este método. Los valores de G_1 y G_2 se han tomado directamente del tra-

bajo de de Ligny⁶ así como los de L_1 y L_2 . Ambas series de parámetros aparecen en dicha tabla.

Tabla 6: Valores de los parámetros G_1 y G_2 para el cálculos de las solubilidades⁶ y solubilidades expresadas como fracción molar ($x_2 \cdot 10^4$) a 298.15 K para clorobenceno y bromobenceno.

Gases			Clorobenceno	Bromobenceno
	G_1	G_2	$L_1=5,665$ $L_2=0,193$	$L_1=5,718$ $L_2=0,372$
			$x_2 \cdot 10^4$	$x_2 \cdot 10^4$
He	2,769	0,267	0,759	0,601
Ne	2,697	0,384	1,075	0,897
Ar	2,362	0,009	9,21	6,96
Kr	2,177	-0,167	29,6	21,5
Xe	1,944	-0,264	120	86,3
H ₂	2,587	0,011	2,65	1,95
D ₂	2,616	-0,100	2,27	1,60
N ₂	2,468	0,087	4,78	3,67
O ₂	2,376	0,041	8,34	6,37
CH ₄	2,238	-0,381	23,6	15,7
C ₂ H ₄	1,949	-0,025	102	79,7
C ₂ H ₆	1,924	-0,343	141	98,6
CF ₄	2,369	0,334	7,33	6,25
SF ₆	2,110	0,335	32,6	28,7
CO ₂	2,044	-0,005	58,1	45,4

Si tenemos en cuenta los resultados obtenidos al aplicar la teoría de la cavidad, el método del análisis factorial y los obtenidos al aplicar la teoría de la disolución regular⁷, podemos decir que los tres son comparables, siendo los gases nobles mas ligeros He y Ne los que mas se desvían en la teoría de la cavidad, hecho que no se da con los otros dos tratamientos.

BIBLIOGRAFIA

- 1- H. Reiss, H.L. Frisch, E.L. Helfand, J.L. Lebowitz, J. Chem Phys. 31, 369, (1959)
- 2- H. Reiss, H.L. Frisch, J.L. Lebowitz, J.Chem. Phys. 32, 119 (1960)
- 3- R.A. Pierotti, J.Chem. Phys. 67, 1840 (1963)
- 4- R.A. Pierotti, J. Phys. Chem. 69, 281 (1965)
- 5- R.A. Pierotti, Chem. Rev. 76, 717, (1976)
- 6- C.L. de Ligny, N.G. van der Veen, J.C. van Houwelingen, I&EC: Fundamentals, 15,336 (1976)
- 7- M.C. López, M.A. Gallardo, J.S. Urieta C. Gutiérrez Losa, Rev. Acad.Ciencias Zaragoza, (1987)
- 8- J.Carnicer, F.Gibanel, J.S.Urieta, C.Gutiérrez Losa,Rev. Acad.Ciencias Zaragoza,34,115(1979)
- 9- R.J.Dack "Techiques of Chemistry"(Solutions and Solubilities) 8, Ed. Weissberger,(1975)
- 10- E.Wilhelm, R.Battino, J.Chem.Phys., 55, 4012, (1971)
- 11- E.Wilhelm, R.Battino, J.Chem. Thermodynamics, 3, 379, (1971)
- 12- A.L.McClellan. "Tables of experimental dipole moments" Freeman, S.Francisco (1973)
- 13- N.Brükl, J.J. Kim, Z.Phys.Chem.Neue.Folg. 126,133, (1981)
- 14- C.L.de Ligny,G.H.Niewport, W.K.Brederode,W.E.Hammers,Technometrics,23, 91, (1981)

H_m^E Y V_m^E DE MEZCLAS BINARIAS 1-BROMOBUTANO + n-ALCOHOL

P. PÉREZ, M. GRACIA, C. GUTIÉRREZ LOSA

Departamento de Química Física. Facultad de Ciencias.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

Excess molar enthalpies and excess molar volumes of 1-bromobutane + ethanol, + n-hexanol, and + n-decanol at 298.15 K (occasionally at 308.15 K), were measured. Excess molar partial volumes of 1-bromobutane (V_1^E) and of alkanol (V_2^E) in the different mixtures were calculated. The coefficient of temperature for the excess properties were explained by taking into account the Br ↔ aliphatic interaction.

1. INTRODUCCION.-

Se presentan en este trabajo las medidas calorimétricas de los sistemas 1-bromobutano + etanol, + n-hexanol, y + n-decanol a 298.15 K (ocasionalmente a 308.15 K) y las medidas volumétricas de los mismos sistemas a 298.15 y 308.15 K.

Los resultados experimentales obtenidos, se comparan con los de los sistemas 1-clorobutano + n-alcohol⁽¹⁾ para estudiar la influencia que tiene el cambio en el átomo de halógeno en las propiedades de exceso.

2. EXPERIMENTAL.-

Líquidos:

Los productos utilizados fueron 1-bromobutano, Fluka (>98 moles por ciento); etanol, Fluka (>99.8 moles por ciento); n-hexanol y n-decanol, ambos Fluka (>99 moles por ciento). Durante su uso se mantuvieron en contacto con tamiz molecular.

Procedimiento:

Los resultados experimentales de entalpía de exceso fueron obtenidos utilizando una técnica calorimétrica puesta a punto en este Departamento⁽²⁾ y descrita en otro lugar.⁽³⁾

Para la determinación experimental de volúmenes de exceso hemos seguido el método dilatométrico de acuerdo con la técnica descrita por Duncan et al. (4)

El dilatómetro se llena a vacío con mercurio cuya finalidad es mantener los líquidos separados antes de la mezcla. Los líquidos previamente desgasificados se introducen en el dilatómetro mediante una jeringa hipodérmica provista de un "estirón" de vidrio. Las cantidades de ambos líquidos se determinan por pesada con una balanza Mettler-B 5 C 1000 que permite realizar pesadas de hasta 1000 g con una imprecisión de ± 0.1 mg. Por último, el dilatómetro se cierra con un capilar previamente calibrado con mercurio bidestilado cuya relación de equivalencia es:

$$\frac{\Delta V}{\Delta h} = 2.865 \times 10^{-4} \text{ cm}^3 \cdot \text{mm}^{-1}$$

donde ΔV es la variación de volumen que corresponde a una longitud Δh del capilar.

Para la observación del menisco de mercurio en el tubo capilar se utiliza un catetómetro "Wild" que permite realizar lecturas con una imprecisión de ± 0.01 mm.

El proceso de mezcla se lleva a cabo haciendo oscilar el dilatómetro un ángulo, aproximadamente, de 60° en sentidos opuestos. Unas pinzas de acero inoxidable dispuestas en la pared del baño termostático sirven de soporte al dilatómetro a través de un juego de conos de bronce, mecanismo éste que permite realizar la mezcla sin necesidad de sacar el dilatómetro del baño y sin modificar su posición; de esta manera solo son necesarias dos lecturas catetométricas, una antes y otra después de la mezcla completa.

La temperatura del baño termostático está controlada por un termoregulador Haake-E52 que la mantiene estable en ± 2 mK. El control de las oscilaciones térmicas se lleva a cabo con un termómetro Beckmann.

El error relativo que afecta a los resultados experimentales es, en general, inferior al 1%.

3. RESULTADOS.-

Los resultados experimentales han sido aproximados a una función polinómica de exponente fraccionario del tipo:

$$Q^E = x_1 x_2 \sum_{j=0} c_j x_2^{j/2} \quad (1)$$

donde Q^E es H^E o V^E y x_2 la fracción molar de alcohol. Esta función, que ha sido utilizada por otros autores (5,6) en el estudio de sistemas alcohólicos, representa mejor el comportamiento experimental en la región muy diluida en alcohol -donde la propiedad de exceso varía abruptamente- que la ya clásica de Redlich-Kister, y, en consecuencia, se necesitan menos términos para obtener desviaciones estandar comparables.

En las tablas 1-9 se recogen los resultados experimentales, los calculados con la función anterior, y su diferencia.

En la tabla 10 se muestran los coeficientes c_j obtenidos de un análisis por mínimos cuadrados, junto con la desviación estandar $s(Q^E)$ definida por:

$$s(Q^E) = \left\{ \frac{\sum (\delta Q^E)^2}{N - m} \right\}^{1/2}$$

donde N representa el número de datos experimentales y m el número de coeficientes utilizados en la ecuación (1).

En las figuras 1 y 2 se representan los datos experimentales y las curvas obtenidas de la ecuación (1) con coeficientes de la tabla 10.

TABLA 1

1-Bromobutano(1) + etanol(2) a 298,15K

X_2	Experimental	Calculado	δH^E
0,0370	429	428	1
0,0956	660	668	-8
0,1129	709	706	3
0,1434	761	758	3
0,1548	776	773	3
0,2047	822	822	0
0,2922	870	863	7
0,3616	861	861	0
0,4263	830	833	-3
0,4473	810	819	-9
0,5967	650	660	-10
0,7209	489	475	14
0,9158	152	153	-1
0,3066 ^b	1055		
0,3963 ^b	1025		

b: datos experimentales a 308,15K

TABLA 3

1-Bromobutano(1) + decanol(2) a 298,15K

X_2	Experimental	Calculado	δH^E
0,0306	388	388	0
0,0926	756	754	2
0,1718	972	975	-3
0,2391	1071	1070	1
0,2636	1090	1091	-1
0,3299	1110	1117	-7
0,4193	1101	1096	5
0,5143	1030	1016	14
0,6468	828	832	-4
0,7219	688	699	-11
0,8269	484	480	4
0,2668 ^b	1120		
0,2971 ^b	1249		

b: datos experimentales a 308,15K

TABLA 2

1-Bromobutano(1) + hexanol(2) a 298,15K

X_2	Experimental	Calculado	δH^E
0,0706	614	613	1
0,1043	750	756	-6
0,1351	857	848	9
0,1983	965	966	-1
0,3075	1033	1040	-7
0,3484	1036	1041	-5
0,4536	1005	996	9
0,4966	964	959	5
0,6674	715	721	-6
0,7313	599	598	1
0,8100	430	429	1
0,3213 ^b	1196		
0,3582 ^b	1203		

b: datos experimentales a 308,15K

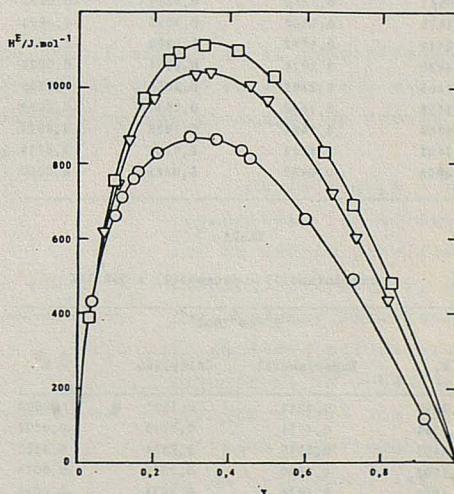


FIGURA 1. Entalpías de exceso a 298,15K: (1-x) 1-C₄H₉Br - x C₂H₅OH: ○, C₂; ▽, C₆; □, C₈; ◇, C₁₀.

TABLA 4

1-Bromobutano(1) + etanol(2) a 298,15K

X_2	Experimental	Calculado	δV^E
0,0778	0,1194	0,1196	-0,0002
0,1650	0,1814	0,1789	0,0025
0,2358	0,1984	0,2005	-0,0021
0,2437	0,1992	0,2019	-0,0027
0,3376	0,2066	0,2074	-0,0008
0,3768	0,2066	0,2048	0,0018
0,4806	0,1928	0,1886	0,0042
0,5015	0,1848	0,1840	0,0008
0,5929	0,1576	0,1598	-0,0022
0,7809	0,0925	0,0945	-0,0020
0,9026	0,0446	0,0440	0,0006

TABLA 5

1-Bromobutano(1) + etanol(2) a 308,15K

X_2	Experimental	Calculado	δV^E
0,1486	0,2071	0,2071	0,0000
0,2321	0,2408	0,2409	-0,0001
0,3355	0,2515	0,2518	-0,0003
0,4576	0,2398	0,2386	0,0012
0,5398	0,2181	0,2190	-0,0009
0,8602	0,0831	0,0831	0,0000

TABLA 6

1-Bromobutano(1) + decanol(2) a 298,15K

X_2	Experimental	Calculado	δV^E
0,0372	0,0680	0,0679	0,0001
0,0965	0,1250	0,1253	-0,0003
0,1475	0,1550	0,1553	-0,0003
0,2110	0,1787	0,1800	-0,0013
0,3030	0,2024	0,2004	0,0020
0,4465	0,2102	0,2056	0,0046
0,5458	0,1878	0,1917	-0,0039
0,6869	0,1461	0,1488	-0,0027
0,7692	0,1148	0,1134	0,0014
0,8998	0,0487	0,0485	0,0002

TABLA 7

1-Bromobutano(1) + hexanol(2) a 298,15K

X_2	Experimental	Calculado	δV^E
0,0405	0,0705	0,0705	0,0000
0,1377	0,1246	0,1263	-0,0017
0,1785	0,1418	0,1400	0,0018
0,2383	0,1578	0,1555	0,0023
0,2774	0,1619	0,1627	-0,0008
0,3219	0,1669	0,1681	-0,0012
0,3843	0,1687	0,1701	-0,0014
0,4535	0,1642	0,1646	-0,0004
0,5229	0,1528	0,1516	0,0012
0,7775	0,0681	0,0678	0,0003
0,8623	0,0385	0,0387	-0,0002

TABLA 8

1-Bromobutano(1) + hexanol(2) a 308,15K

X_2	Experimental	Calculado	δV^E
0,0870	0,1296	0,1295	0,0001
0,1737	0,1696	0,1703	-0,0007
0,2645	0,1890	0,1874	0,0016
0,3597	0,1878	0,1890	-0,0012
0,5059	0,1621	0,1618	0,0003
0,8002	0,0321	0,0321	0,0000

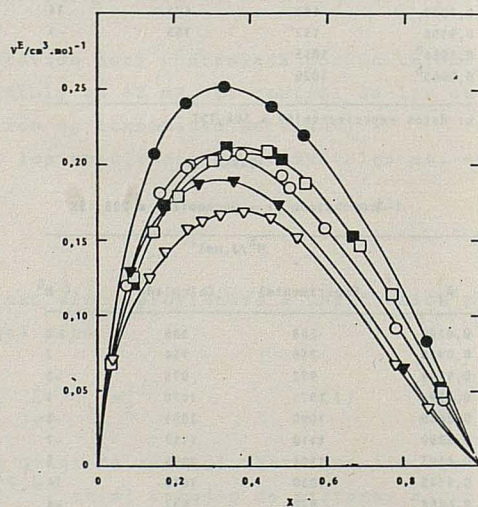


FIGURA 2. Volúmenes de exceso a 298,15: (1-x) 1-C₄H₉Br + x C₁₀H₂₁OH; 308,15: (1-x) 1-C₄H₉Br + x C₁₀H₂₁OH. C₂: ○, C₄: □, C₆: ▽, C₈: ▴, C₁₀: ●.

TABLA 10

Sistema	C ₀	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	s(Q ^E)
x ₁ 1-C ₄ H ₉ Br + x ₂ C ₂ H ₅ OH	26650	-109744	208933	-187827	63949	8
+ x ₂ 1-C ₆ H ₁₃ OH	18713	-48140	54696	-23186		7
+ x ₂ 1-C ₁₀ H ₂₁ OH	23317	-79185	138383	-121837	42741	8
x ₁ 1-C ₄ H ₉ Br + x ₂ C ₂ H ₅ OH	2,8325	-5,1944	3,9476	-1,1201		0,0026
+ x ₂ C ₂ H ₅ OH (a)	3,6631	-7,5067	6,6873	-2,2091		0,0011
+ x ₂ 1-C ₆ H ₁₃ OH	4,2098	-18,1035	37,4161	-35,4399	12,1592	0,0017
+ x ₂ 1-C ₆ H ₁₃ OH (a)	4,0675	-12,6827	17,7657	-9,4127		0,0015
+ x ₂ 1-C ₁₀ H ₂₁ OH	3,1171	-8,1342	10,2638	-4,8020		0,0029
+ x ₂ 1-C ₁₀ H ₂₁ OH (a)	2,4392	-4,5756	4,6059	-1,9941		0,0009

(a): sistemas estudiados a 308,15K.

4. DISCUSION.-

Las entalpías de exceso de los n-alcoholes en disolvente inerte tienen su origen en la contribución positiva por rotura de enlaces de hidrógeno, mientras que en mezclas con disolvente halogenado es necesario tener en cuenta dos contribuciones adicionales, una positiva, por contactos alifático-halógeno, que aumentará con la longitud del alcohol, y otra negativa, debida a la formación de contactos halógeno-oxhidrilo que será un valor promedio de contactos con oxhidrilos libres o con oxhidrilos implicados en enlace de hidrógeno.

Comparando nuestros resultados experimentales con los de los sistemas 1-clorobutano + n-alcohol ⁽¹⁾ se observa que la entalpía de exceso es poco sensible al cambio de halógeno.

La influencia del halógeno es más significativa en el comportamiento volumétrico. Así, en 1-C₄H₉Br el volumen de exceso es mayor que en 1-C₄H₉Cl y, además, el efecto es más importante con alcoholes de cadena larga, tal como se muestra en la tabla:

TABLA 11

V_m^E (x=0.5) de {1-C₄H₉X + n-C_cH_{2c+1}OH} a 298.15 K

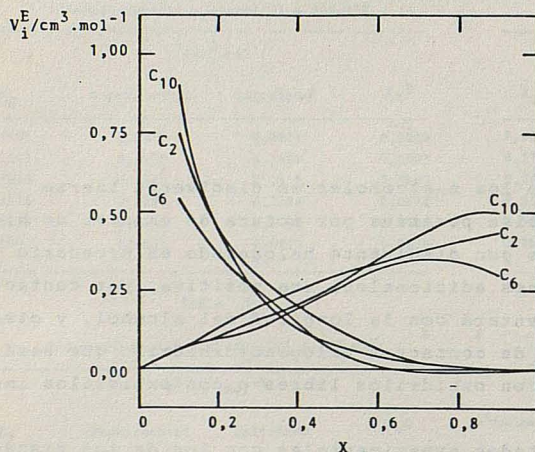
X	10 ⁶ V _m ^E / m ³ .mol ⁻¹		
	c=2	c=6	c=10
Cl	0,136	0,030	0,043
Br	0,186	0,157	0,200

En la figura 3 se representan los volúmenes de exceso parciales molares, a 298.15 K, de los sistemas estudiados. Se obtienen por diferenciación de la ecuación (1) que ajusta los resultados experimentales y, en este caso, las funciones que los definen tienen la forma,

$$V_1^E = x_2^2 \{ -(1/2)C_1 x_2^{-1/2} + (C_0 - C_2) + (3/2)(C_1 - C_3)x_2^{1/2} + 2(C_2 - C_4)x_2 + \\ (5/2)(C_3 - C_5)x_2^{3/2} + 3(C_4 - C_6)x_2^2 + (7/2)C_5 x_2^{5/2} + 4C_6 x_2^3 + \dots \}$$

$$V_2^E = (1-x_2) \{ C_0 + (3/2)C_1 x_2^{1/2} + (2C_2 - C_0)x_2 + ((5/2)C_3 - (3/2)C_1)x_2^{3/2} + \\ (3C_4 - 2C_2)x_2^2 + ((7/2)C_5 - (5/2)C_3)x_2^{5/2} + (4C_6 - 3C_4)x_2^3 + (7/2)C_5 x_2^{7/2} + \\ 4C_6 x_2^4 + \dots \}$$

Figura 3 Volúmenes de exceso parciales molares a 298,15K: $(1-x)$ 1-C₄H₉Br + x C₆H₅CH₂OH.



donde x_2 es la fracción molar de alcohol, V_1^E y V_2^E representan los volúmenes de exceso parciales molares del disolvente y alcohol, respectivamente.

Los volúmenes de exceso parciales molares (V_1^E) del 1-bromobutano son positivos y mayores que los del 1-clorobutano⁽¹⁾ y están controlados por la interacción halógeno-alifático.

El coeficiente de temperatura del volumen de exceso $(\partial V_m^E / \partial T)_P$, es positivo y disminuye con la longitud del alcohol (ver figura 2).

Los autores expresan su agradecimiento a la Comisión Asesora de Investigación Científica y Técnica (Madrid) (Proyecto 1788/82) por su ayuda económica.

5. BIBLIOGRAFIA.-

1. P. Pérez, F. Royo, M. Gracia, C. Gutiérrez Losa, J. Chem. Thermodynamics 1985, 17, 711.
2. C. Gutiérrez Losa, M. Gracia, Rev. Acad. Cienc. Exactas Fis.-Quim. Natur Zaragoza 1971, 26, 1.
3. J. I. Iribarren, P. Pérez, F. Royo, M. Gracia, C. Gutiérrez Losa, Rev. Acad. Ciencias Zaragoza (pendiente de publicación).
4. W. A. Duncan, J. P. Sheridan, F. L. Swinton, Trans. Faraday Soc. 1966, 62, 1090.
5. E. A. Ottestedt, R. W. Missen, Trans. Faraday Soc. 1962, 58, 879.
6. A. J. Treszczanowicz, G. C. Benson, J. Chem. Thermodynamics 1977, 9, 1189.

H_m^E Y V_m^E DE MEZCLAS BINARIAS 1-YODOBUTANO + n-ALCOHOL

P. PÉREZ, M. GRACIA, C. GUTIÉRREZ LOSA

Departamento de Química Física. Facultad de Ciencias.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

Excess molar enthalpies and excess molar volumes of 1-iodobutane + ethanol, + n-hexanol, and + n-decanol at 298.15 K (V_m^E also at 308.15 K), were measured. Excess molar partial volumes of 1-iodobutane (V_1^E) and of alkanol (V_2^E) in the different mixtures were calculated. The results are compared with those observed when as first component we use 1-chlorobutane or 1-bromobutane.

1. INTRODUCCION.-

Se han medido entalpías y volúmenes de exceso de 1-yodobutano + etanol, + n-hexanol, y + n-decanol a 298.15 K (V_m^E también a 308.15 K).

Este trabajo forma parte de un estudio más amplio cuyo fin es analizar la influencia del átomo de halógeno en el comportamiento termodinámico (H_m^E y V_m^E) de sistemas $\{1-C_4H_9X + n-C_{c+1}H_{2c+1}OH\}$, donde $X=Cl,^{(1)} Br,^{(2)} I$, y $c=2, 6, 10$.

2. EXPERIMENTAL.-

Líquidos:

Los productos utilizados fueron 1-yodobutano, Fluka (>99 moles por ciento); etanol, Fluka (>99.8 moles por ciento); n-hexanol y n-decanol, ambos Fluka (>99 moles por ciento). Para eliminar trazas de humedad se mantuvieron en contacto con tamiz molecular (0.3 nm).

Procedimiento:

Los resultados experimentales se recogen en las tablas 1-9 junto a los calculados utilizando la función polinómica,⁽²⁾

$$Q^E = x_1 x_2 \sum_{j=0}^{\infty} c_j x_j^{j/2} \quad (1)$$

y la diferencia entre ambos valores.

Q^E representa H^E ó V^E y x_2 la fracción molar de alcohol.

Los coeficientes de la ecuación (1), para cada sistema, se muestran en la tabla 10 junto a la desviación estandar $s(Q^E)$ definida por,

$$s(Q^E) = \left\{ \frac{\sum (\delta H^E)^2}{N - m} \right\}^{1/2}$$

donde N representa el número de datos experimentales y m el número de coeficientes utilizados en la ecuación (1).

En las figuras 1 y 2 se representan los resultados experimentales y las curvas obtenidas de la ecuación (1) con coeficientes de la tabla 10.

TABLA 1

1-Yodobutano(1) + etanol(2) a 298,15K			
$H^E/J.mol^{-1}$			
x_2	Experimental	Calculado	δH^E
0,0276	339	337	2
0,0718	559	573	-14
0,1021	669	666	3
0,1759	817	804	13
0,1836	815	814	1
0,1986	845	832	13
0,2656	904	892	12
0,3270	911	918	-7
0,3860	899	920	-21
0,4411	876	901	-25
0,5552	809	811	-2
0,6269	738	726	12
0,7493	551	549	2
0,7817	509	495	14
0,9271	200	204	-4
0,2533 ^b	1034		
0,3403 ^b	1053		
0,4146 ^b	1054		

b: datos experimentales a 308,15K

TABLA 2

1-Yodobutano(1) + hexanol(2) a 298,15K			
$H^E/J.mol^{-1}$			
x_2	Experimental	Calculado	δH^E
0,0617	610	608	2
0,0789	678	681	-3
0,1451	859	866	-7
0,2238	1011	1001	10
0,2708	1060	1054	6
0,2852	1071	1066	5
0,3062	1077	1081	-4
0,3939	1101	1099	2
0,4806	1037	1053	-16
0,4988	1028	1036	-8
0,6127	886	886	0
0,7323	694	675	19
0,8154	502	506	-4
0,8466	434	437	-3
0,3533 ^b	1250		
0,3752 ^b	1220		

b: datos experimentales a 308,15K

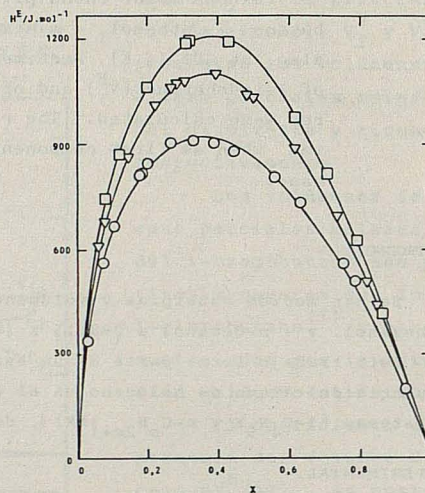


FIGURA 1. Entalpías de exceso a 298,15K: (1-x) 1-C₄H₉I + x C₂H₅OH; O: C₂; ▽: C₄; □: C₁₀.

TABLA 3

1-Yodobutano(1) + decanol(2) a 298,15K			
$H^E/J.mol^{-1}$			
x_2	Experimental	Calculado	δH^E
0,0807	748	745	3
0,1209	871	881	-10
0,1986	1065	1052	11
0,3116	1186	1187	-1
0,3172	1196	1190	6
0,4295	1190	1201	-11
0,6165	974	983	-9
0,7040	816	809	7
0,7873	625	617	8
0,8621	420	425	-5
0,3009 ^b	1349		
0,3971 ^b	1352		

b: datos experimentales a 308,15K

TABLA 4

1-Yodobutano(1) + etanol(2) a 298,15K

X_2	$V^E/\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$		δV^E
	Experimental	Calculado	
0,0570	0,1195	0,1196	-0,0001
0,1399	0,1962	0,1957	0,0005
0,2568	0,2549	0,2546	0,0003
0,3067	0,2672	0,2693	-0,0021
0,3738	0,2804	0,2810	-0,0006
0,4918	0,2840	0,2816	0,0024
0,5767	0,2705	0,2689	0,0016
0,6460	0,2502	0,2514	-0,0012
0,7693	0,2019	0,2028	-0,0009
0,9616	0,0503	0,0502	0,0001

TABLA 5

1-Yodobutano(1) + etanol(2) a 308,15K

X_2	$V^E/\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$		δV^E
	Experimental	Calculado	
0,1909	0,2630	0,2630	0,0000
0,3848	0,3196	0,3195	0,0001
0,4216	0,3208	0,3206	0,0002
0,4530	0,3197	0,3201	-0,0004
0,7648	0,2424	0,2423	0,0001
0,8528	0,1810	0,1810	0,0000

TABLA 8

1-Yodobutano(1) + decanol(2) a 298,15K

X_2	$V^E/\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$		δV^E
	Experimental	Calculado	
0,0543	0,1702	0,1698	0,0004
0,1193	0,2368	0,2409	-0,0041
0,1739	0,2975	0,2913	0,0062
0,2809	0,3697	0,3705	-0,0008
0,3632	0,3980	0,3991	-0,0011
0,4990	0,3750	0,3799	-0,0049
0,6256	0,3212	0,3163	0,0049
0,8286	0,1943	0,1950	-0,0007

TABLA 9

1-Yodobutano(1) + decanol(2) a 308,15K

X_2	$V^E/\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$		δV^E
	Experimental	Calculado	
0,1102	0,2448	0,2448	0,0000
0,2594	0,3818	0,3820	-0,0002
0,4381	0,4256	0,4252	0,0004
0,4783	0,4215	0,4214	0,0001
0,6045	0,3806	0,3810	-0,0004
0,8527	0,1826	0,1826	0,0000

TABLA 6

1-Yodobutano(1) + hexanol(2) a 298,15K

X_2	$V^E/\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$		δV^E
	Experimental	Calculado	
0,0430	0,0995	0,0994	0,0001
0,0701	0,1380	0,1372	0,0008
0,1248	0,1851	0,1908	-0,0057
0,1705	0,2279	0,2225	0,0054
0,2513	0,2634	0,2627	0,0007
0,3453	0,2895	0,2912	-0,0017
0,3914	0,3007	0,2986	0,0021
0,5558	0,2892	0,2871	0,0021
0,6224	0,2603	0,2647	-0,0044
0,8638	0,1108	0,1102	0,0006

TABLA 7

1-Yodobutano(1) + hexanol(2) a 308,15K

X_2	$V^E/\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$		δV^E
	Experimental	Calculado	
0,1442	0,2388	0,2388	0,0000
0,2717	0,3152	0,3150	0,0002
0,3855	0,3536	0,3543	-0,0007
0,5090	0,3459	0,3443	0,0016
0,5782	0,3189	0,3202	-0,0013
0,6491	0,2886	0,2882	0,0004

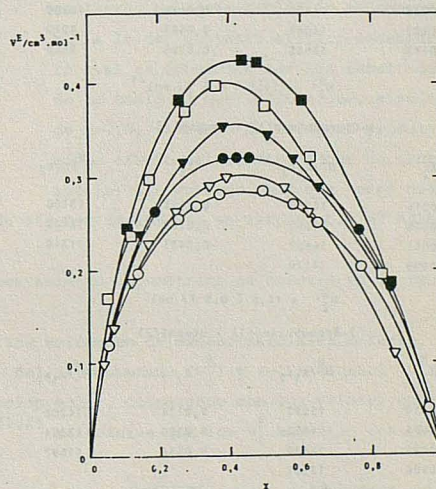


FIGURA 2. Volúmenes de exceso a 298,15K: (1-x) 1-C₄H₉I + x C₆H₁₃OH: O, C₂: ▽, C₆: □, C₁₀: △. A 308,15K: (1-x) 1-C₄H₉I + x C₆H₁₃OH: ●, C₂: ◆, C₆: ■, C₁₀: ▲.

TABLA 10

Sistema	C ₀	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	s (°E)
x ₁ 1-C ₄ H ₉ I + x ₂ C ₂ H ₅ OH	24825	-102629	203533	-192595	70080	14
+ x ₂ 1-C ₆ H ₁₃ OH	29706	-129526	269571	-263211	97181	10
+ x ₂ 1-C ₁₀ H ₂₁ OH	30665	-127731	254951	-238082	83807	11
x ₁ 1-C ₄ H ₉ I + x ₂ C ₂ H ₅ OH	4,9737	-18,6152	37,9723	-38,1294	15,2279	0,0018
+ x ₂ C ₂ H ₅ OH (a)	2,7181	-1,4455	-3,8776	4,2738		0,0003
+ x ₂ 1-C ₆ H ₁₃ OH	4,1887	-11,4186	15,3489	-7,3463		0,0039
+ x ₂ 1-C ₆ H ₁₃ OH (a)	12,9121	-70,9466	168,0075	-177,0947	69,0004	0,0022
+ x ₂ 1-C ₁₀ H ₂₁ OH	10,9537	-58,7416	145,0959	-160,3207	64,9395	0,0059
+ x ₂ 1-C ₁₀ H ₂₁ OH (a)	4,3942	-8,1153	8,2819	-3,1864		0,0004

(a): sistemas estudiados a 308,15K.

4. DISCUSION .-

Las entalpías de exceso parciales molares a dilución infinita de alcohol en 1-clorobutano, 1-bromobutano ó 1-yodobutano son, aproximadamente de 15 kJ.mol⁻¹ (Tabla 11), valor este,

TABLA 11

1-Clorobutano(1) + etanol(2)			
X ₂	H ^E /x ₁ x ₂	X ₂	H ^E /x ₁ x ₂
0,0017	14490	0,0235	12701
0,0017	14550	0,0236	13004
0,0028	14570	0,0313	11600
0,0079	14550	0,0434	10620
0,0085	14400	0,0446	10560
0,0105	14084	0,0587	8940
0,0143	13635	0,0703	8500

$$H_2^E = 14,5 \pm 0,5 \text{ KJ.mol}^{-1}$$

1-Clorobutano(1) + hexanol(2)

X ₂	H ^E /x ₁ x ₂	X ₂	H ^E /x ₁ x ₂
0,0015	14450	0,0138	13700
0,0076	14300	0,0269	12455
0,0082	14400	0,0433	11340
0,0099	14110		

$$H_2^E = 14,5 \pm 0,5 \text{ KJ.mol}^{-1}$$

1-Bromobutano(1) + etanol(2)

X ₂	H ^E /x ₁ x ₂	X ₂	H ^E /x ₁ x ₂
0,0019	15292	0,0124	14208
0,0063	14855	0,0183	13304
0,0096	14830	0,0338	11697
0,0104	13992		

$$H_2^E = 15,0 \pm 0,5 \text{ KJ.mol}^{-1}$$

1-Yodobutano(1) + etanol(2)

X ₂	H ^E /x ₁ x ₂	X ₂	H ^E /x ₁ x ₂
0,0002	15003	0,0090	14688
0,0003	15389	0,0155	14876
0,0016	14398	0,0274	13608

$$H_2^E = 15,0 \pm 0,5 \text{ KJ.mol}^{-1}$$

TABLA 12

Contacto	η	U/kJ.mol ⁻¹
alifático-oxhidrilo	0,09726	5,77
alifático-cloro	0,46709	1,89
alifático-bromo	0,44409	2,01
alifático-yodo	0,43628	2,06
cloro-oxhidrilo	0,06360	6,83
bromo-oxhidrilo	0,07710	6,35
yodo-oxhidrilo	0,10350	5,62

TABLA 13

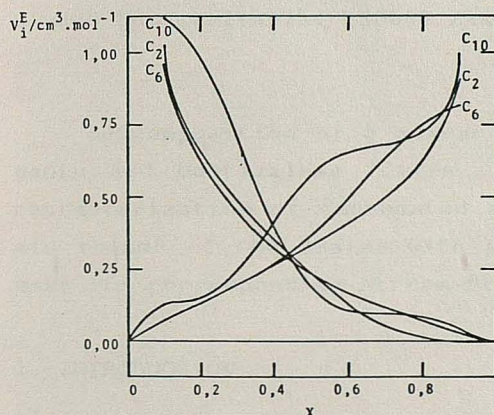
H ^E (x=0,5) /J.mol ⁻¹			
1-C ₄ H ₉ Cl	1-C ₆ H ₁₃ OH	Suma	1-C ₆ H ₁₃ OH
+	+		+
n-C ₆ H ₁₄	n-C ₅ H ₁₂		1-C ₄ H ₉ Cl
496	378*	874	905
1-C ₄ H ₉ Br	1-C ₆ H ₁₃ OH		1-C ₆ H ₁₃ OH
+	+	Suma	+
n-C ₆ H ₁₄	n-C ₅ H ₁₂		1-C ₄ H ₉ Br
528	378	906	956
1-C ₄ H ₉ I	1-C ₆ H ₁₃ OH		1-C ₆ H ₁₃ OH
+	+	Suma	+
n-C ₆ H ₁₄	n-C ₅ H ₁₂		1-C ₄ H ₉ I
540	378	918	1035
1-C ₄ H ₉ Cl	1-C ₈ H ₁₇ OH		1-C ₈ H ₁₇ OH
+	+	Suma	+
n-C ₈ H ₁₈	n-C ₅ H ₁₂		1-C ₄ H ₉ OH
553	357*	910	927

* Valores tomados de la ref. 7

TABLA 14

 $V_m^E(x=0.5)$ de $1-C_4H_9X + n-C_6H_{2c+1}OH$ a 298.15 K

X	$10^6 V_m^E / m^3 \cdot mol^{-1}$		
	c=2	c=6	c=10
Cl	0,136	0,030	0,043
Br	0,186	0,157	0,200
I	0,280	0,300	0,380

 Figura 3. Volúmenes de exceso parciales molares a 298,15K: $(1-x) 1-C_4H_9I + x C_6H_{2c+1}OH$.


que la equivalencia se debe a una compensación de efectos de los que es responsable el halógeno.

El efecto del cambio de halógeno en el comportamiento volumétrico se muestra en la tabla 14, donde se recogen datos de V_m^E a $x=0,5$.

En la figura 3 se representan, a 298.15 K, los volúmenes de exceso parciales molares, obtenidos por diferenciación de la ecuación (1), del 1-yodobutano (V_1^E) y del n-alcohol (V_2^E), positivos prácticamente en todo el rango de fracción molar. Comparando con los valores obtenidos para los restantes derivados halogenados, ^(1,2) se observa que los V_1^E aumentan con el tamaño del halógeno.

Por último, señalar que el coeficiente de temperatura, $(\partial Q^E / \partial T)_P$, es positivo para ambas propiedades de exceso.

Los autores expresan su agradecimiento a la Comisión Asesora de Investigación Científica y Técnica (Madrid) (Proyecto 1788/82) por su ayuda económica.

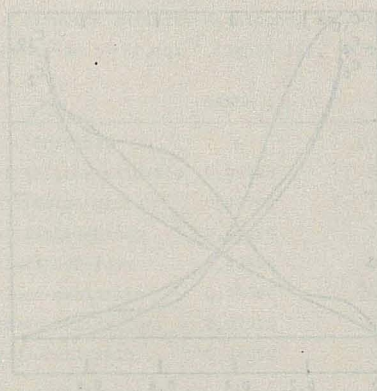
inferior en unos $9 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ al que se obtiene cuando la dilución se lleva a cabo en un disolvente inerte. El desplazamiento de la entalpía de exceso parcial límite puede interpretarse como una entalpía de transferencia de 1 mol de monómeros de alcohol desde una disolución infinitamente diluida en un disolvente inerte a otra infinitamente diluida en disolvente halogenado; el cambio de entalpía en este proceso será de $-9 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ y representa la estabilización de las moléculas de alcohol debido a una interacción específica entre el halógeno y el oxhidrilo alcohólico.

En la tabla 12 se recogen los valores de los parámetros de intercambio y de las correspondientes energías que intervienen en el tratamiento reticular de Barker, ⁽⁶⁾ calculados por un método iterativo. ⁽⁵⁾

La energía de intercambio para los contactos halógeno-oxhidrilo es comparable a la del contacto alifático-oxhidrilo lo cual es coherente con los resultados de la tabla 13 que indican que, alrededor de $x=0,5$, un átomo de halógeno produce el mismo efecto calorimétrico que un grupo metilo; sin embargo, hay que hacer notar

5. BIBLIOGRAFIA.-

1. P. Pérez, F. Royo, M. Gracia, C. Gutiérrez Losa, J. Chem. Thermodynamics 1985, 17, 711.
2. P. Pérez, M. Gracia, C. Gutiérrez Losa, Rev. Acad. Ciencias Zaragoza (pendiente de publicación).
3. C. Gutiérrez Losa, M. Gracia, Rev. Acad. Cienc. Exactas Fis.-Quim. Natur. Zaragoza 1971, 26, 1.
4. W. A. Duncan, J. P. Sheridan, F. L. Swinton, Trans. Faraday Soc. 1966, 62, 1090.
5. J. I. Iribarren, P. Pérez, F. Royo, M. Gracia, C. Gutiérrez Losa, Rev. Acad. Ciencias Zaragoza (pendiente de publicación).
6. J. A. Barker, J. Chem. Phys. 1952, 20, 1526.
7. S. G. Collins, J. J. Christensen, R. M. Izatt, R. W. Hanks, J. Chem. Thermodynamics 1980, 12, 609.



LOS ACUIFEROS CARBONATADOS DEL MACIZO DE GUARA, ANALISIS E INTERPRETACION DE LAS CURVAS DE RECESION DE CAUDALES DE LOS RIOS QUE LO DRENAN.

J.A. SÁNCHEZ, F.J. MARTÍNEZ, J.L. DE MIGUEL Y J. SAN ROMÁN

Cátedra de Hidrogeología. Departamento de Ciencias de la Tierra.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

Descomposition of 8 stream flow recession curves from Alcanadre and Guatizalema rivers is employed to make hydrodynamic characterization of carbonated aquifers. It's related the dynamic volume of the basins with rivers stream-flow, which lets us make its corresponding stream-flow recession theoretical curve.

1.-INTRODUCCION

El Macizo de Guara (figura 1) constituye una sierra de unos 240 km² de los que 200 corresponden al río Alcanadre y el resto al Guatizalema. Estos ríos, así como sus afluentes Balces, Mascún, Fórmiga y Calcón en el Alcanadre, y Lapillera en el Guatizalema, atraviesan el Macizo formando profundas gargantas fluviales "cañones de Guara" que en numerosos tramos superan los 800 metros de profundidad.

Geológicamente el Macizo queda enclavado dentro de la cadena Pirenaica en la unidad denominada "Sierras Exteriores Prepirenaicas" Puigdefábregas (1975), formada por materiales meso-cenozoicos que constituyen el frente de amortiguamiento del "Manto de Gavarnie" Seguret (1970). Litológicamente predominan los materiales carbonatados que con potencias superiores a los 800 m., constituyen los únicos acuíferos relevantes del macizo.

El estudio hidrogeológico de este Macizo fue iniciado por el IGME(1981) dentro del P.I.A.S como parte de la cuenca del Ebro; posteriormente, IGME (1983) se continuó su estudio, destacando

el control hidrométrico realizado y su primer modelo matemático Yagüe et.Al.(1984). Mas recientemente el Macizo de Guara ha sido estudiado como parte de la Comarca Hidrológica nº 6: "Sierras de Guara y sus somontanos" distinguiendo mediante criterios hidrogeológicos e hidroquímicos -Martínez, F.J. et Al.(1986)- un acuífero triásico de porosidad y permeabilidad elevada (carniolas), de otro Cretácico-Eoceno de alta permeabilidad, pero baja capacidad de almacenamiento.

2.-DESCOMPOSICION DE LAS CURVAS DE RECESION DE CAUDALES

Se han considerado los datos de caudales medios diarios del río Alcanadre en Lascellas (E.A. nº 91) que por su situación inmediatamente al sur de las Sierras, recoge toda la escorrentía de la parte del Macizo drenada por la Cuenca; el resto, lo recoge el río Guatizalema cuyos caudales son aforados en el embalse de Vadiello. El método seguido para la descomposición de las curvas ha sido el preconizado por SCHOELLER, H.(1962), para su realización se ha preparado un sencillo programa de ordenador que ajusta por mínimos cuadrados, las rectas de regresión a los sucesivos tramos requeridos.

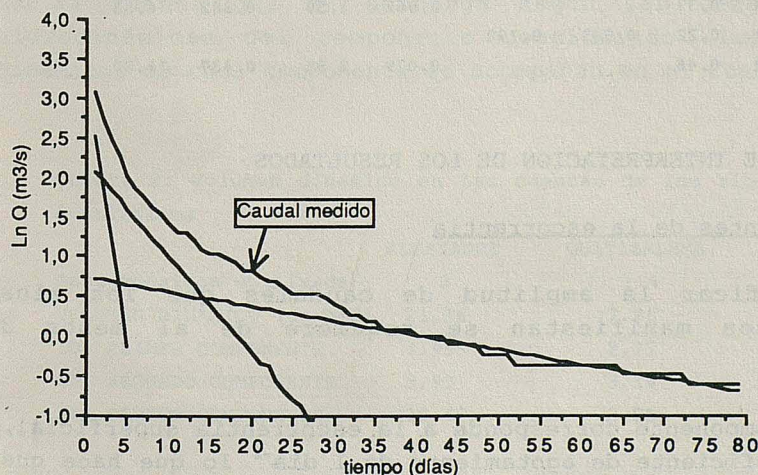


Figura 2.-Componentes de la curva de recesión de caudales del río Alcanadre

De este modo (figura 2) se han descompuesto 4 curvas en el río

Alcanadre, y otras tantas en el Guatizalema; los valores de α (coeficiente de agotamiento) y Q_0 (caudal en el inicio de la decrecida) se acompañan en el CUADRO 1.

Cuadro 1: Parámetros obtenidos en la descomposición de las curvas de recesión de caudales de los ríos Alcanadre y Guatizalema

RIO ALCANADRE EN LASCELLAS (E.A. N° 91)

- | | |
|------------------------------|------------------------------|
| 1. 27-Sep-1981 a 11-Dic-1981 | 3. 09-Nov-1980 a 16-Ene-1981 |
| 2. 10-May-1981 a 15-Ago-1981 | 4. 12-Ago-1977 a 20-Sep-1977 |

N° Q inic. Q final TERCER COMPONENTE SEGUNDO COMPONENTE PRIMER COMPONENTE

	m3/s	m3/s	α	Q_0	α	Q_0	α	Q_0
1	4,62	0,46	0,013	1,07	0,160	2,08		
2	21,8	0,54	0,018	2,10	0,119	8,96	0,660	23,91
3	33,5	0,90	0,014	2,04	0,094	8,86	0,914	52,48
4	5,26	0,76	0,010	1,19	0,203	3,61		

RIO GUATIZALEMA EN VADIELLO

- | | |
|------------------------------|------------------------------|
| 1. 31-Dic-1981 a 10-Ene-1982 | 4. 28-Oct-1979 a 28-Nov-1979 |
| 2. 20-Ene-1982 a 08-Feb-1982 | 5. 15-Abr-1980 a 07-May-1980 |
| 3. 22-Oct-1977 a 17-Nov-1977 | |

N° Q inic. Q final TERCER COMPONENTE SEGUNDO COMPONENTE PRIMER COMPONENTE

	m3/s	m3/s	α	Q_0	α	Q_0	α	Q_0
1	16,90	1,04			0,069	2,54	0,674	21,63
2	4,37	0,34			0,085	1,92		
3	7,84	0,37			0,062	1,50	0,382	6,53
4	1,97	0,22	0,033	0,790				
5	10,43	0,46			0,079	2,95	0,437	11,80

3.-ANALISIS E INTERPRETACION DE LOS RESULTADOS

3.1.-Componentes de la escorrentia

Para justificar la amplitud de caudales que los ríos prepirenaicos manifiestan se requiere de al menos 3 componentes:

El primer componente corresponde a la escorrentia superficial, tiene un coeficiente de agotamiento de 1 día^{-1} lo que hace que prácticamente a los 7 días de su máxima aportación (Q_0), el caudal que suministre a los ríos sea irrelevante (menos de 50 l/s).

El segundo componente tiene un valor de α del orden de una décima parte del anterior ($\alpha = 0.1$ a 0.2 días^{-1} ; corresponde a la escorrentía subterránea no regulada ó flujo turbulento en el acuífero carbonatado debido a las grandes fisuras y cavidades. Porcentualmente su mayor incidencia en el cuadal de los ríos prepireniacos se alcanza a los 4 días de iniciada la decrecida, pero pasados 35-40 días su aportación pasa a ser irrelevante.

El tercer componente tiene un valor de α que oscila entre 0.01 en el Alcanadre y 0.03 en el Guatizalema, corresponde a la aportación subterránea regulada por los acuíferos carbonatados. Cuando la única aportación que reciben los ríos procede de ésta componente se considera que circula su "caudal de base". Este caudal se alcanza a los 35-40 días y es de 950 l/s en el Alcanadre y de 250 l/s en el Guatizalema.

3.2.-Volumen dinámico en las cuencas

El volumen de agua que almacenado en una cuenca es susceptible de influir en el caudal del río constituye su "volumen dinámico". Para cada uno de los componentes de la escorrentía, la división de Q_0 por α nos da la parte del "volumen dinámico" de la cuenca que se descarga según las características hidrodinámicas del componente considerado. Los volúmenes dinámicos de cada componente se acompañan en el Cuadro 2.

Cuadro 2: Volumen dinamico en las cuencas de los ríos Alcanadre y Guatizalema

	ALCANADRE	GUATIZALEMA
Descomposición utilizada	3	1+4
VOLUMEN DINAMICO (en hm ³)	21,36	7,96
ID. PRIMER COMPONENTE	4,95	2,77
ID. SEGUNDO COMPONENTE	3,93	3,14
ID. TERCER COMPONENTE	12,48	2,05

Como puede observarse el volumen del último componente es en Alcanadre muy superior al de los otros dos; éste volumen representa la capacidad del embalse subterráneo que situada por

encima de la cota de drenaje del río está sometido a una evacuación lenta; es decir, está regulada.

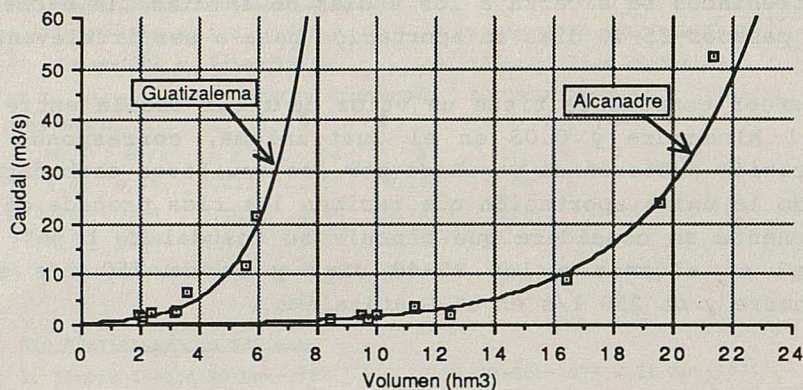


Figura 3.-Relación entre volumen dinámico y caudal de los ríos Guatizalema y Alcanadre

Relacionando el caudal de un río con el volumen dinámico de la cuenca se obtienen las gráficas de la fig. 3; en ambos se obtiene un aceptable ajuste con ecuaciones de tipo exponencial: en el Alcanadre $Q=0.096 \cdot e^{0.286 \cdot V}$, y en el Guatizalema $Q=0.388 \cdot e^{0.66 \cdot V}$

3.3.-Curvas teóricas de recesión de caudales

Si consideramos un caudal inicial, que puede ser el de la máxima crecida conocida (75.9 m³/s en el Alcanadre 52.7 m³/s en el Guatizalema), podremos saber cual es el volumen de agua que en ese momento existía en la cuenca (23.6 hm³ Alcanadre, 7.44 hm³ Guatizalema); si a este volumen descontamos el que se evacua el primer día, tendremos un nuevo volumen que aplicando las ecuaciones anteriores nos darán el caudal del día siguiente. Repitiendo este proceso día a día se construye una curva teórica de recesión de caudales para los ríos Alcanadre y Guatizalema que abarca toda la amplitud de caudales conocida (fig 4).

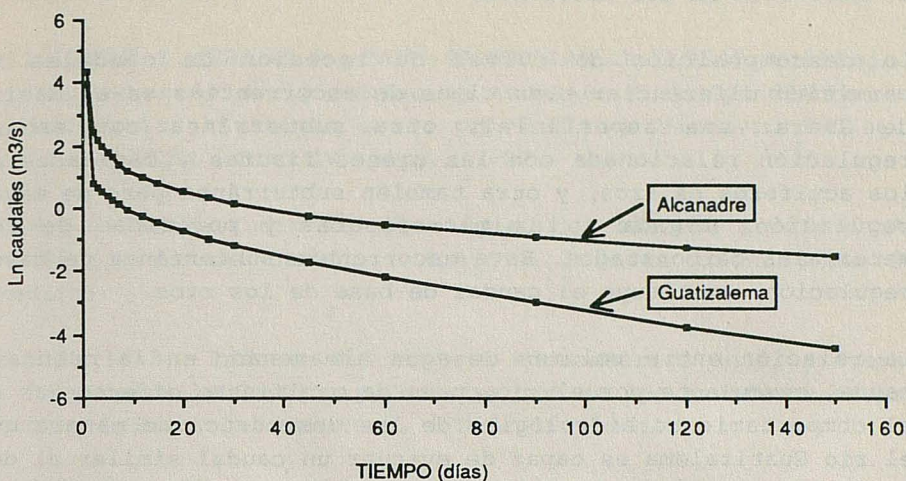


Figura 4.-Curvas teóricas de recesión de caudales en los ríos Alcanadre y Guatizalema

Las curvas realizadas permiten conocer la evolución del volumen dinámico de las cuencas y el caudal de los ríos para diferentes periodos sin precipitación. La forma que presentan las decrecidas en estos ríos hace que transcurridos más de 30 días sin precipitación, el caudal que presenta apenas dependa del caudal inicial; por ello, la siguiente relación de caudales correspondientes a diferentes periodos de tiempo sin precipitación, tiene una aceptable validez:

tiempo	caudal (l/s)	caudal (l/s)
<u>días</u>	<u>Alcanadre</u>	<u>Guatizalema</u>
30	1207	315
40	910	216
45	809	182
50	727	155
60	603	115
75	478	75
90	393	51
105	332	35

4.-DISCUSION DE LOS RESULTADOS

La descomposición de curvas de recesión de caudales ha permitido diferenciar tres tipos de escorrentías en el Macizo de Guara: una superficial, otra subterránea con escasa regulación relacionada con las grandes fisuras y cavidades de los acuíferos calizos, y otra también subterránea pero de mayor regulación, ligada a las microfisuras y porosidad de los materiales carbonatados. Esta escorrentía subterránea de mayor regulación constituye el caudal de base de los ríos.

La relación entre volumen de agua almacenado en la cuenca y caudal circulante por el río, pone de manifiesto diferencias en el comportamiento hidrológico de las dos cuencas de manera que el río Guatizalema es capaz de evacuar un caudal similar al del Alcanadre con un volumen de agua en su cuenca casi 4 veces menor; esto hace que la regulación natural de los recursos hídricos sea en el Guatizalema notablemente inferior.

Los elevados caudales producidos en las cuencas pueden disminuirse -regulación- evitando que el volumen de agua almacenado en las cuencas supere determinados valores: 3 hm³ en el Guatizalema, y 13 hm³ en el Alcanadre; para ello, se precisaría de sondeos que mediante bombeo vaciaran parcialmente los acuíferos -en la época de demandas (junio a septiembre)-, llenándose posteriormente en los periodos mas lluviosos (octubre a mayo).

Las curvas teóricas de recesión de caudales confirman el menor poder de regulación natural que la cuenca del Guatizalema tiene respecto a la del Alcanadre.

Estas curvas constituyen un método válido de previsión de caudales en decrecida y pueden ser utilizadas para, comparandolas con las series de caudales registrados, calcular el volumen de agua útil o recarga (precipitación menos evapotranspiración) que recibe el macizo.

5.-BIBLIOGRAFIA

ANTIGUEDAD, I.; ERASO, A. y CRUZ-SANJULIAN, J. (1984): Análisis e interpretación de la curvas de recesión correspondientes a dos surgencias karsticas en la provincia de Vizcaya. I Cong. Esp. de Geología. Tomo IV, págs. 17-27.

I.G.M.E. (1981): estudio hidrogeológico del sistema acuífero nº 67 "Sinclinal de Jaca", P.I.A.S., Informe técnico Nº 9 (inédito).

I.G.M.E. (1983): Informe del control hidrométrico en el sistema 67. Proy. para la Gestión y Conservación de los acuíferos de la Cuenca del Ebro. Informe técn. 67E-82/10 (inédito)

MANGIN, A. (1975): Contribution a l'étude hydrodynamique des aquiferes karstiques. Thèse de l'Université de Dijon. 710 pp.

MARTINEZ GIL, F.J.; PABLO, F. y SANCHEZ, J.A. (1986): Estudio hidrogeoquímico de los acuíferos carbonatados del Macizo de Guara. Jor. sobre el Karst en Euskadi tomo I-Comunic. 253-273.

M.O.P.U. (1986): Modelo digital para estudiar la regulación del embalse subterráneo, drenado por el manantial de Arteta (Navarra). Direc. Gral. de Obras Hidráulicas. (Inédito).

PUIGDEFABREGAS, C. (1975): La sedimentación molásica en la cuenca de Jaca. Monogr. del Inst. de Est. Pirenaicos, nº 104. 188 pp.

SANCHEZ, J.A. (1987): Estudio hidrogeológico e hidroquímico de las Sierras de Guara y sus Somontanos. Tesis Doctoral Universidad de Zaragoza, 851 pp. (Inédito).

SCHOELLER, H. (1962): Les eaux souterraines. Masson. 642 págs. Paris

SEGURET, M. (1970): Etude tectonique des nappes et series décollées de la partie centrale du versant Sud Pyrénées. These Université Montpellier. Public. USTECA.

YAGUE, A.; MARTINEZ, P.; BATLLE, A. y DEL POZO, M. (1984): Simulación del flujo subterráneo en el macizo kárstico de la Sierra de Guara (Huesca) y calibración mediante criterios geostatísticos. I. Cong. Español de Geología. Tomo IV, página 453-469.

INFLUENCIA DE LAS CONDICIONES DE MEDIDA DE pH EN EL CALCULO DE LA DISTRIBUCION DE ESPECIES EN EQUILIBRIO DE UN SISTEMA ACUOSO NATURAL

L.F. AUQUE, J. FERNÁNDEZ, J.M. TENA, M.J. GIMENO, J. MANDADO Y P. TOLOSA

Departamento de Ciencias de la Tierra. Facultad de Ciencias. Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

The use of speciation-solubility codes to study natural aqueous systems need the utilization of analytical parameters accurate to the natural conditions of the solution. In this paper we investigate the variation of the aqueous speciation model in function of the pH measurement conditions. Use of pH measurement, in field or laboratory conditions, for the same water sample changes the speciation picture critically because of its variation during sample transport.

2 2 3

1. INTRODUCCION

Desde que en 1962 GARRELS & THOMPSON plantearon la metodología para el cálculo de la distribución iónica en equilibrio homogéneo para las aguas naturales, los modelos de especiación en sistemas acuosos han ido adquiriendo progresivamente un mayor grado de refinamiento y optimización. Esta evolución ha sido catalizada, fundamentalmente, por la implementación de estos modelos dentro de sistemas y programas informáticos más o menos complejos.

En la actualidad existe una amplia oferta de este tipo de programas, a los que casi siempre se les ha añadido el cálculo de índices de saturación como complemento al modelo puro de especiación. Por ello se han agrupado bajo el nombre genérico de programas o modelos de "especiación-solubilidad" (WOLERY, 1979; NORDSTROM & MUÑOZ, 1986).

La utilización de este tipo de programas es cada vez más frecuente dentro de las distintas ramas de la Geoquímica pero, como es natural, los resultados que se obtienen serán función de los datos analíticos que suministremos al programa y, por tanto, de la metodología empleada en su adquisición.

Por otro lado, dentro del campo de la modelización geoquímica existen otros muchos tipos de programas más complejos y potentes que los de especiación. Son, por ejemplo, los modelos de pautas de reacción (ver p.e. WOLERY, 1979; NORDSTROM & MUÑOZ, 1986) o los modelos de transporte de masa y reacción química acoplados (ver p.e. RUBIN, 1983). Sin embargo, en todos ellos el punto de partida inicial es un adecuado modelo de especiación lo más ajustado posible a las

condiciones reales de los sistemas hídricos considerados; por tanto, su adecuada utilización conlleva, si cabe, un mayor control de los parámetros analíticos suministrados.

Uno de los datos de entrada requerido en los modelos de especiación es el pH, parámetro imprescindible a la hora de realizar el estudio fisicoquímico en sistemas hidroquímicos y sobre cuyas variaciones se centra este estudio.

La infraestructura termodinámica de los programas de especiación requiere un conocimiento exacto del pH del sistema en orden a valorar el ajuste del resultado obtenido a las condiciones reales; en general, parece admitido que el pH utilizable es el determinado en campo con metodologías de medida más o menos complejas (véase, p.e. NORTON & PANICHI, 1978; FRITZ, 1981; CRIAUD & FOUILLAC, 1986; etc.). Sin embargo, un repaso a la bibliografía sobre geoquímica de aguas permite constatar la gran variedad de formas de presentación de este dato, cuando no su ausencia, así como los muy diferentes planteamientos realizados a la hora de su aplicación en la realización del estudio de la distribución de especies de la solución acuosa considerada. De esta manera, es frecuente observar modelos de especiación realizados a partir de datos de pH medidos en condiciones de laboratorio, a 25 °C, e incluso realizados a partir del pH de laboratorio corregido en función de la diferencia de temperatura entre las condiciones analíticas y las de surgencia.

En este trabajo se pretenden cuantificar las variaciones obtenidas en la aplicación de un programa de especiación, según la opción de pH y temperatura que se elija, a la hora de aproximar el resultado a las condiciones reales del sistema estudiado.

2. METODOLOGIA

Para la realización de este estudio hemos partido de muestras de las que se poseyeran datos que cumpliesen una serie de condiciones:

- (a) que presentasen valores analíticos de pH de campo y laboratorio.
- (b) que el pH determinado en el campo lo hubiese sido mediante electrodosensitivo calibrado en función de la temperatura de surgencia, como metodología más frecuentemente usada.
- (c) que existiera una cierta variación entre la temperatura de surgencia y la estándar de laboratorio (25 °C) para analizar la influencia de la temperatura considerada en el modelo.
- (d) que el resto de datos analíticos, en especial los referidos a aniones y a la alcalinidad, hubieran sido determinados mediante metodologías que nos permitan referir a las condiciones reales del sistema estudiado.

Se ha seleccionado una serie de muestras acordes con los requisitos que acabamos de señalar, pertenecientes unas (Ca-1 a Ca-10) a una campaña realizada por nuestro grupo de trabajo y otras (SA-2, SA-4, SA-6 y Al) recogidas de la bibliografía. Los datos analíticos pueden verse en la tabla 1.

Las muestras Ca-1 a Ca-7 corresponden a surgencias termal en Arnedillo (Rioja) (Ca-1 a Ca-4) y Fitero (Navarra) (Ca-5 a Ca-7) tratandose de aguas asociadas a reservorios carbonatado-evaporíticos, con una temperatura máxima de surgencia de 48 °C. Las muestras Ca-8 a Ca-10 corresponden a surgencias de la misma zona de carácter bicarbonatado cálcico pero no termal (AUQUE *et al.*, 1989). Los datos analíticos referidos como SA-2, SA-4, SA-6 y Al corresponden a surgencias termal

TABLA 1. Análisis químicos de las muestras consideradas en este estudio. En mgr/l. (Ver texto).

	Ca-1	Ca-2	Ca-3	Ca-4	Ca-5	Ca-6	Ca-7	Ca-8	Ca-9	Ca-10	Sa-2	Sa-4	Sa-6	Al
HCO ₃ ⁻	181.22	182.44	184.27	175.73	178.78	180.00	176.90	191.59	190.98	210.51	32.95	48.81	22.21	33.56
Cl ⁻	2931.61	2711.80	2682.37	2830.21	1516.32	1502.14	1595.03	3.55	0.71	8.19	23.04	3.51	5.67	1.28
SO ₄ ⁼	1488.89	1368.82	1354.41	1480.21	1296.78	1431.26	1325.59	57.15	52.35	18.25	10.66	19.02	10.37	1.44
NO ₃ ⁻	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	10.17	3.35	4.71	5.15
F ⁻	2.3	2.20	2.00	2.30	0.95	0.90	0.92	0.06	0.06	0.05	1.80	4.99	2.39	1.14
Ca ⁺⁺	422.84	416.03	381.56	408.10	428.45	482.96	410.27	63.33	62.32	65.73	14.59	8.94	7.57	8.14
Mg ⁺⁺	92.48	85.70	83.85	86.40	111.20	95.76	120.43	12.15	12.03	5.83	4.01	2.53	2.26	2.09
Na ⁺	1954.13	1724.23	1908.15	2023.10	877.29	850.60	942.58	5.06	3.45	3.45	10.69	19.13	7.49	2.30
K ⁺	21.89	21.89	21.50	21.89	29.32	29.32	35.18	0.59	0.59	0.58	3.95	2.74	3.05	1.84
Li ⁺	0.69	0.66	0.69	0.69	0.69	0.69	0.83	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.02	0.007
Sr ⁺⁺	9.42	8.46	8.59	9.86	10.91	10.91	7.79	0.26	0.31	0.00	0.09	0.00	0.00	0.00
Al ⁺³	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.007	0.008	0.012	0.007
SiO ₂	21.78	21.57	19.74	21.29	19.83	18.84	21.23	7.00	7.20	3.81	14.06	30.34	15.50	13.10
B	0.13	0.12	0.12	0.11	0.17	0.09	0.13	0.00	0.00	0.00	-	-	-	-
pH _c [*]	6.60	6.70	6.60	6.60	6.50	6.40	6.40	6.15	6.20	6.00	6.65	7.00	6.78	6.46
pH _l [*]	7.11	7.44	7.55	7.25	6.81	7.11	7.08	7.62	7.69	7.44	7.52	7.90	7.43	7.66
T (°C) ^{**}	47.60	43.00	43.50	48.00	48.00	48.00	48.20	15.40	15.00	14.10	21.80	30.20	30.60	9.90

* pH_c = pH de campo, en condiciones de surgencia; pH_l = pH de laboratorio.

** Temperatura en las condiciones de surgencia.

asociadas a materiales graníticos en Plombières (Macizo Central Francés) y sin fenómenos de desgasificación importantes según FRITZ (1981).

Los grupos de muestras seleccionados van a permitir el análisis de los efectos del pH en los sistemas carbonatos-solución y aluminosilicatos-solución; por otro lado, el incluir ejemplos del Macizo Central Francés, con aguas asociadas a materiales graníticos, junto con otros en los que las aguas están asociadas a materiales carbonatado-evaporíticos, va a facilitar la comparación de los resultados obtenidos en el sistema carbonatado respecto a soluciones con concentraciones muy diferentes de los elementos participantes en dicho sistema.

Los programas de especiación-solubilidad utilizados para este estudio han sido el WATEQ4F (BALL *et al.*, 1987) y el WATEQB (ARIKAN, 1988), análogos en cuanto a su estructura operativa pero con algunas variaciones en sus bases de datos termodinámicos. Ambos programas se han manejado indistintamente para obtener una mayor generalización de los resultados y evitar las posibles influencias inherentes al propio modelo.

Como indicación de la respuesta global a las variaciones en el modelo de especiación realizado en función del pH considerado, se han tomado los índices de saturación (I.S.) definidos como:

$$I.S. = \log [PAI / K(T)]$$

donde PAI es el producto de actividad iónica y K(T) la constante de equilibrio del mineral correspondiente a la temperatura T. Si $I.S. > 0$ la solución está sobresaturada respecto al mineral considerado, y tanto más cuanto mayor sea el valor; si $I.S. < 0$ la solución estará tanto más subsaturada cuanto menor sea el valor obtenido; y si $I.S. \approx 0$, la solución estará en equilibrio respecto a ese mineral. Para un mejor conocimiento de los principios y el funcionamiento de este tipo de programas nos remitimos a la extensa bibliografía existente sobre el tema (TRUESDALL & JONES, 1974; PLUMMER *et al.*, 1976; WIGLEY, 1977; NORDSTROM *et al.*, 1979; JENNE, 1981; NORDSTROM & MUÑOZ, 1986; etc.).

3. ANALISIS COMPARATIVO

Partiendo de los datos apuntados en la tabla 1 se ha realizado la modelización de cada muestra de tres formas distintas:

- (a) Considerando el pH de laboratorio y la temperatura estándar de 25 °C.
- (b) Considerando el pH de laboratorio y la temperatura real de cada surgencia.
- (c) Considerando el pH medido en el campo y la temperatura de surgencia.

En una primera observación de los resultados obtenidos expresados mediante cuatro ejemplos representativos de las muestras consideradas en la tabla 1 (figuras 1 y 2 y tablas 2 y 3), podemos apreciar que las diferencias presentes entre los modelos que parten de las condiciones de laboratorio (pH de laboratorio y 25 °C) y aquellos que lo hacen de condiciones de surgencia, son muy notables, en especial si atendemos a los minerales relacionados con el sistema carbonatado (calcita, aragonito, dolomita y magnesita).

TABLA 2. Indices de saturación de las muestras Ca-6 y Ca-8 según distintos parámetros de pH y temperatura suministrados al programa WATEQ4F.

	MUESTRA Ca-6			MUESTRA Ca-8		
	pH lab=7.11	pH lab=7.11	pH campo=6.4	pH lab=7.62	pH lab=7.62	pH campo=6.15
	Temp= 25 °C	Temp= 48 °C	Temp= 48 °C	Temp= 25 °C	Temp= 15.4 °C	Temp= 15.4 °C
ANHIDRITA	-.192	-.046	-.045	-1.794	-1.874	-1.872
YESO	-.230	-.296	-.295	-1.831	-1.812	-1.811
CALCITA	.193	.466	-.265	.237	.103	-1.362
DOLOMITA	-.034	.620	-.844	.021	-.356	-3.286
MAGNESITA	-.718	-.284	-1.015	-.707	-.946	-2.411
ARAGONITO	.049	.338	-.394	.094	-.048	-1.513
FLUORITA	-.434	-.738	-.738	-3.134	-3.002	-3.001
CELESTINA	-.225	-.250	-.250	-2.671	-2.670	-2.670
HALITA	-4.604	-4.661	-4.661	-9.314	-9.291	-9.291
ESTRONCIANITA	-.878	-.681	-1.413	-1.677	-1.760	-3.226
CUARZO	.514	.185	.188	.071	.224	.225
SEPIOLITA	-3.076	-1.717	-4.671	-3.640	-4.284	-10.159

TABLA 3. Indices de saturación de las muestras Sa-2 y Sa-6 según distintos parámetros de pH y temperatura suministrados al programa WATEQB.

	MUESTRA Sa-2			MUESTRA Sa-6		
	pH lab=7.52	pH lab=7.52	pH campo=6.65	pH lab=7.43	pH lab=7.43	pH campo=6.78
	Temp= 25 °C	Temp= 21.8 °C	Temp=21.8 °C	Temp= 25 °C	Temp= 30.6 °C	Temp= 30.6 °C
ADULARIA	-.976	-.739	-2.448	-.746	-1.142	-2.041
ALBITA	-2.882	-2.685	-4.394	-2.695	-3.024	-3.923
ANHIDRITA	-3.227	-3.259	-3.259	-3.472	-3.417	-3.417
ANORTITA	-4.733	-4.610	-8.033	-4.494	-4.689	-6.492
CALCITA	-1.162	-1.208	-2.074	-1.682	-1.605	-2.252
DOLOMITA	-2.538	-2.669	-4.402	-3.544	-3.330	-4.623
YESO	-3.009	-3.006	-3.006	-3.254	-3.225	-3.254
HALITA	-8.147	-8.140	-8.140	-8.900	-8.913	-8.913
ILLITA	-.058	.357	-2.534	.558	-.132	-1.425
CAOLINITA	1.345	1.718	.034	2.029	1.407	.904
LAUMONTITA	-.367	-.069	-3.489	-.043	-.537	-2.338
MICA POTASICA	-.756	-.243	-3.639	.072	-.781	-2.186
MONT. CALCICA	.590	1.034	-1.212	1.370	.631	-.169

En la figura 1A se representan los distintos índices de saturación obtenidos según diferentes opciones de modelización consideradas para la muestra Ca-6. Tal y como puede observarse, las variaciones producidas al considerar pH de campo o laboratorio en el modelo de especiación pueden ser tan importantes como para pasar de condiciones de sobresaturación a subsaturación respecto a calcita, aragonito o dolomita. Por otro lado, puede comprobarse que para algunos minerales (yeso, fluorita, cuarzo; tabla 2, Ca-6) la variación de temperatura (de 25 °C en laboratorio a 48 °C en surgencia) supone un cambio en los índices de saturación más importante que el debido a la propia variación de pH.

En la figura 1B se han representado los índices de saturación obtenidos para la muestra Ca-8. Se trata de un agua bicarbonatada en la que la variación de la temperatura de surgencia (15.4 °C) a la de laboratorio (25 °C) es menor que en la muestra anterior y, por tanto, los cambios debidos a la modificación de este parámetro para los minerales fluorita, yeso o cuarzo son, asimismo, menos importantes (tabla 2). Respecto a la influencia del pH considerado en el modelo, continúa siendo tan importante como en el caso anterior.

En la figura 2A y 2B se han representado los resultados obtenidos en la modelización de dos muestras del Macizo Central Francés, la SA-2 y la SA-6 (tabla 3). El ambiente geológico de estas aguas es muy distinto respecto al asociado a las de la zona Fitero-Arnedillo, lo que se refleja en el total de sales disueltas, mucho menor en las primeras (tabla 1) de tal modo que los índices de saturación obtenidos para los minerales considerados están casi siempre por debajo de cero. Sin embargo, los rangos cuantitativos de variación continúan siendo muy importantes.

Respecto a yeso y anhidrita, poco influídos por la variación de pH en las muestras anteriores, continúan manteniendo esta tendencia en las nuevas modelizaciones, a la vez que presentan una escasa variación por la temperatura ya que las diferencias entre las condiciones de campo y las de laboratorio en estas muestras son menores de 6 °C. Sin embargo, para la calcita o la dolomita las variaciones en el índice de saturación según el pH considerado están en el rango de una unidad de I.S., con lo cual continúan siendo muy importantes.

La existencia de datos analíticos de Al en estos ejemplos permite constatar la variación sufrida por el sistema aluminio-solución en función del modelo considerado. De esta manera los I.S. obtenidos según el pH considerado van a ser muy diferentes (compárense p.e. los correspondientes a mica potásica, laumontita o montmorillonita cálcica; tabla 3). Por otro lado, las pequeñas variaciones consideradas en la temperatura para estas muestras, pueden inducir por sí mismas a variaciones de medio punto en el I.S. (p.e. en montmorillonita cálcica, mica potásica).

Las variaciones máximas en los pH considerados para las muestras que se han tomado como ejemplo en este trabajo, oscilan de 0.5 a 1 unidad de pH para cada una de ellas. Evidentemente, los cambios sufridos en la modelización de muestras con una mayor variación desde la determinación de campo a la de laboratorio (tales como la Ca-8, Ca-9 o Ca-10) son todavía más extremos.

4. CONSIDERACIONES Y CONCLUSIONES

Es de dominio general que los sistemas carbonato-solución y aluminio-solución son "pH-dependientes". Existe una amplia bibliografía sobre esta cuestión y no vamos a entrar en este trabajo en una descripción termodinámica de los parámetros y ecuaciones que rigen estos sistemas.

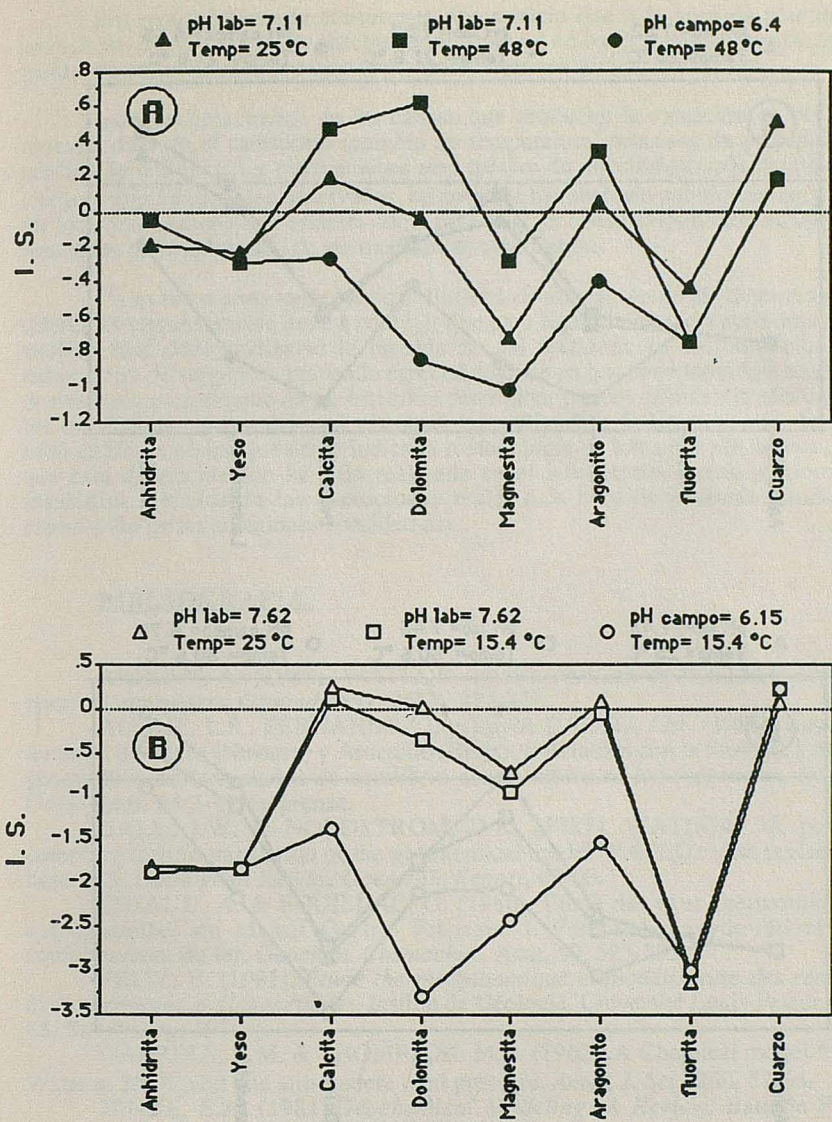


Fig 1.- Índices de saturación calculados con el programa WATEQ4F, en función de distintas condiciones de pH y temperatura, para distintos minerales. A.- muestra Ca-6, B.- muestra Ca-8 (Tabla II).

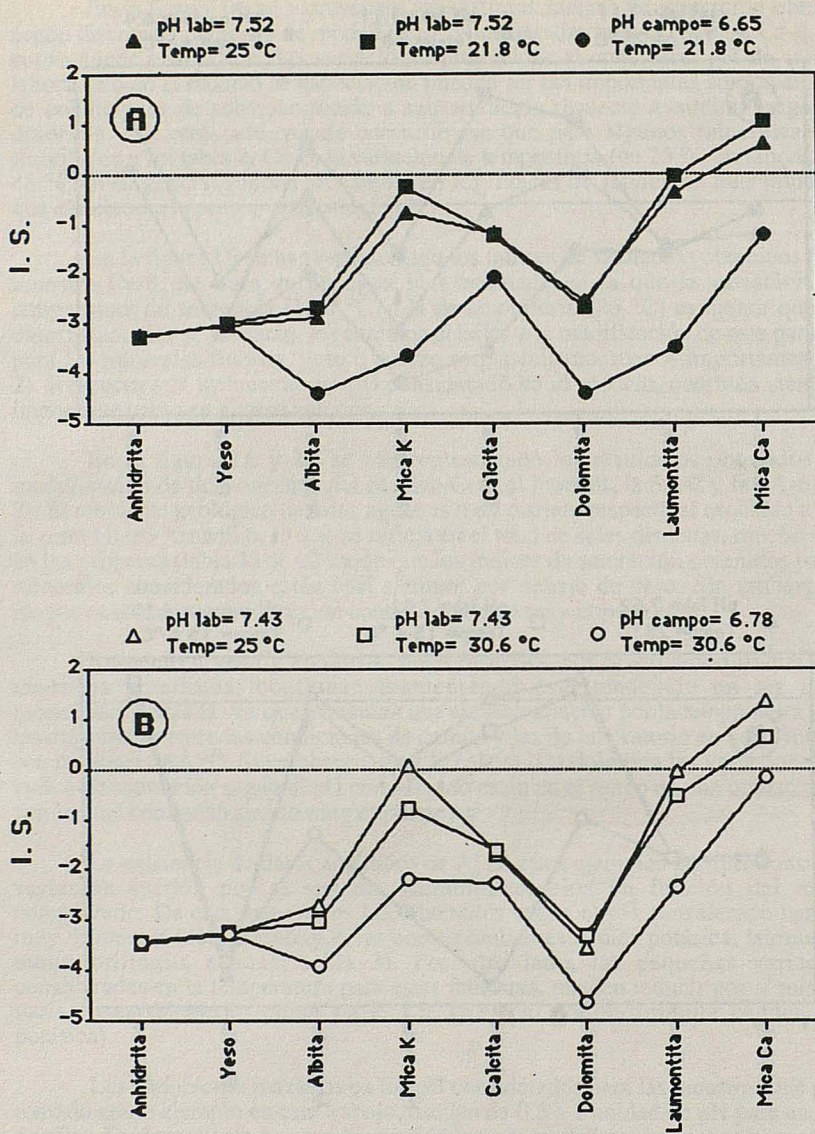


Fig 2.- Índices de saturación calculados con el programa WATEQ B, en función de distintas condiciones de pH y temperatura, para distintos minerales. A.- muestra Sa-2, B.- muestra Sa-6 (Tabla III).

Sin embargo, queda claramente demostrado que a la hora de plantear un análisis de especiación en un sistema hídrico natural no basta la determinación de este parámetro en un momento y bajo unas condiciones analíticas cualesquiera.

Independientemente de las causas que producen la variación de pH en la muestra durante el transporte (cambio de temperatura, procesos de precipitación, pérdida de CO₂, etc.) y cuyo análisis será motivo de otro trabajo más detallado, lo cierto es que los cambios observados, tal como se ha mostrado anteriormente, pueden ser lo suficientemente importantes como para originar considerables diferencias en los resultados de la aplicación de los modelos de especiación.

Un examen somero de las posibilidades de utilización de pH determinado en diferentes circunstancias lleva a concluir que para lograr la máxima aproximación al sistema real debe utilizarse la medida de pH realizada en las condiciones de temperatura de surgencia, poniendo especial cuidado en que la metodología analítica y de muestreo para el resto de parámetros a determinar permita la máxima adecuación a las condiciones naturales del sistema. La utilización indiscriminada de datos bibliográficos en los que no se indica la metodología de toma del pH, o bien en los que esta determinación ha sido realizada en el laboratorio, puede proporcionar resultados alejados de las condiciones reales a la hora de plantear estudios de especiación de las soluciones consideradas.

BIBLIOGRAFIA.

ARIKAN, A. (1988). WATEQB -Basica revision of WATEQF for IBM personal computers. *Groundwater*, 26(2), 222-227.

AUQUE, L.F.; FERNANDEZ, J. y TENA CALVO, J.M. (1988). Las aguas termales de Fitero (Navarra) y Arnedillo (Rioja). I. Relación con la litología y análisis geoquímico de los estados de equilibrio-desequilibrio en las surgencias. *Estudios Geológicos*, 44(3-4), en prensa.

BALL, J.W. & NORDSTROM, D.K. (1987). WATEQ4F. A personal computer fortran translation of the geochemical model WATEQ2 with revised data base. *U.S. Geological Survey, Open-File Report*, 87-50.

CRIAUD, A. & FOUILLAC, G. (1986). Etude des eaux thermominérales carbogazeuses du Massif Central Français. I. Potentiel d'oxydo-réduction et comportement du fer. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 50, 525-533.

FRITZ, B. (1981). *Étude thermodynamique et modélisation des réactions hydrothermales et diagenétiques*. Institut de Géologie. Université Louis-Pasteur, mem. 65, Strasbourg. 197 pp.

GARRELS, R.M. & THOMPSON, M.E. (1962). A Chemical model for Sea Water at 25 °C and one atmosphere total pressure. *Amer. J. Sci.*, 260, 57-66.

JENNE, E.A. (1981). *Geochemical Modeling: A Review*. Battelle Pacific Northwest Laboratory. Richland, WA, PNL-3574.

NORDSTROM, D.K.; PLUMMER, L.N.; WIGLEY, T.M.L.; WOLERY, T.J.; BALL, J.W.; JENNE, E.A.; BASSETT, R.L.; CRERAR, D.A.; FLORENCE, T.M.; FRITZ, B.; HOFFMAN, M.; HOLDREN, G.R.; LAFON, G.M.; MATTIGOD, S.V.; McDUFF, R.E.; MOREL, F.; REDDY, M.M.; SPOSITO, G. & THRAILKILL, J. (1979). A comparison of computerized chemical models for equilibrium calculations in aqueous systems. In *Chemical modeling in aqueous systems. Speciation, sorption, solubility and kinetics* (E.A. Jenne, ed.). ACS Symposium Series 93, American Chemical Society, pp 857-892.

NORDSTROM, D.K. & MUNOZ, J.L. (1986). *Geochemical Thermodynamics*. Blackwell Scientific Publication.

NORTON, D. & PANICHI, C. (1978). Determination of the sources and circulation paths of thermal fluids: the Abano region, northern Italy. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 42, 1283-1294.

PLUMMER, L.N.; JONES, B.F. & TRUESDELL, A.H. (1976). WATEQF. A Fortran IV version of WATEQ, a computer program for calculating chemical equilibrium of natural waters. *U.S. Geological Survey Water Resources Investigations*, 76-13, 61pp.

RUBIN, J. (1983). Transport of reacting solutes in porous media: relation between mathematical nature of problem formulation and chemical nature of reactions. *Water Resources Research*, 19, n°5, 1231-1252.

TRUESDELL, A.H. & JONES, B.F. (1974). WATEQ. A computer program for calculating chemical equilibri of natural waters. *U.S. Geological Survey J. Res.*, 2(2), 233-274.

WIGLEY, T.M.L. (1977). WATSPEC: A computer program for determinating the equilibrium speciation of aqueous solutions. *British Geomorphological Research Group. Tech. Bull.*, 20, 49 pp.

WOLERY, T. J. (1979). *Calculation of chemical equilibrium between aqueous solution and minerals: the EQ3/6 software package*. Lawrence Livermore laboratory, CA, URCL-52658, 41 pp.

INCIDENCIA DE LA TEXTURA EN LA VELOCIDAD DE DISOLUCION DE ROCAS YESIFERAS

F. ALBERTO Y A. NAVAS

U.E.I. de Edafología. Estación Experimental de Aula Dei. C.S.I.C..
Apartado 202. 50080 Zaragoza (España).

In the present study, 53 experimental essays have been carried out in order to quantify the incidence of the texture of the gypsum rocks on the dissolution process. In the two types of alabastrine - gypsum used, and under the same experimental conditions, different - dissolution velocities have been recorded, according to the diverse textural characteristics. Mesocrystalline gypsum dissolution velocity is 22% higher than that of microcrystalline.

1.- INTRODUCCION

En la depresión del Ebro, el yeso es el constituyente mayoritario de las formaciones evaporíticas precipitadas durante su relleno sedimentario en el Terciario, y su existencia es generalizada en los suelos desarrollados sobre litofacies yesíferas. A causa de su naturaleza soluble, su presencia puede alterar grandemente la química de suelos y aguas.

La bibliografía consultada muestra que la velocidad de disolución del yeso está influida por la fuerza iónica de la solución, por las concentraciones de iones calcio o sulfato en solución, por el área superficial y el tamaño de partícula (KEMPER et al., 1975) y por el espesor del plano de difusión existente alrededor de las partículas de yeso (BARRON

/ WILDE, 1971).

Este proceso ha sido descrito mediante una ecuación cinética de reacción de primer grado (LIU y NANCOLLAS, 1971; KEREN y SHAINBERG, 1981; APPELO et al., 1984), basada en la teoría originalmente propuesta por NERNST (1904), que asume la existencia de un gradiente de concentración lineal a través de un plano de solución adherido a la superficie del cristal, cuyo espesor es independiente de la viscosidad y de la temperatura de la solución. Según esta ecuación, la velocidad (dC/dt) con la cual el yeso pasa a la solución es función de la diferencia entre la concentración de la solución a saturación, C_s , y la concentración de la solución en un tiempo dado, C . Así, formalmente, la velocidad de disolución de los cristales de yeso queda matemáticamente descrita como:

$$dC / dt = K (C_s - C) \quad (1)$$

K es el coeficiente de la velocidad de disolución, que es inversamente proporcional al espesor del plano de difusión existente en la superficie de las partículas de yeso y depende linealmente del área superficial y del coeficiente de difusión del yeso en el plano de solución. A su vez, el espesor del plano de difusión es función de la velocidad del agua y de la viscosidad cinemática.

De acuerdo a los datos experimentales de BARTON y WILDE (1971) cuando el cociente C/C_s es extremadamente pequeño, los factores que controlan la velocidad de disolución son exclusivamente físicos, tales como el área superficial expuesta, el espesor del plano de difusión, y la velocidad a la cual el Ca^{++} disuelto es transferido. Con el incremento de la concentración de Ca^{++} en la solución, la velocidad de disolución comienza a estar afectada por su concentración, aunque los factores físicos aún siguen siendo importantes. Finalmente, a mas altas concentraciones de Ca^{++} , los iones SO_4^{--} podrían entrar en juego.

Pero además, la velocidad de disolución del yeso depende de la naturaleza del material. Este hecho ha sido efectivamente constatado por KEREN y SHAINBERG (1981), que registran mayores velocidades de disolución en el yeso industrial respecto del mineral, debido a las diferencias de densidad entre el yeso industrial (2.11 g/cm^3), subproducto de la industria de fertilizantes fosfatados, y el de origen mineral (2.32 g/cm^3). Esta es también la razón por la que CRABTREE y TRUDGILL (1984) constatan mayores velocidades de disolución en el yeso comercial obtenido tras la adición de agua al hemihidrato.

La incidencia del tamaño y la forma de los cristales en la velocidad de disolución del yeso ha sido estudiada experimentalmente en laboratorio por CAMPBELL y YANICK (1932), HARDIE (1967) y HESSE (1974); sin embargo no se tienen referencias de estudios de estos aspectos en campo.

Como señalan LIU y NANCOLLAS (1971), KEMPER et al. (1975) y MANDADO et al. (1984), el proceso de disolución del yeso es un fenómeno superficial que está directamente relacionado con el área expuesta, por tanto, la textura de la roca yesífera es uno de los factores físicos que condiciona su solubilidad.

A este respecto, sería lógico pensar que los diferentes tipos texturales del yeso (alabastrino, sacaróideo, megacristalino, lenticular, en turrón, etc.,) presentarán, a igualdad de condiciones experimentales, distintas velocidades de disolución en función de las diferencias de tamaño cristalino, trabazón de los cristales e interposición de matriz u otros agentes cementantes, de forma que la velocidad de disolución se incrementará con la combinación de aquellos elementos texturales que impliquen un aumento del área superficial. Además, la presencia de poros, microfisuras, u otras interrupciones del esqueleto mineralógico intensificarán este proceso. Por ello, el objetivo de este estudio es

cuantificar la incidencia de la textura de la roca yesífera en el proceso de disolución.

2.- MATERIAL Y METODOS

El estudio experimental de disolución se ha realizado mediante la inmersión de rocas yesíferas suspendidas en cursos de agua naturales, totalizando 53 ensayos.

El material seleccionado consiste en seis rocas de yesos alabastrinos micro y mesocristalinos, tres de cada tipo textural, que proceden de las canteras de Quinto de Ebro, pertenecientes a la Formación Yesos de Zaragoza (Aquitaniense-Vindoboniense).

La estructura de las rocas yesíferas es nodular en turrón, con nódulos coalescentes y finas interposiciones de material lutítico. Las texturas son diagenéticas secundarias, originadas por hidratación de anhidrita nodular tipo chicken-wire (MANDADO, 1987).

Los yesos alabastrinos microcristalinos están constituidos por cristales alotriomorfos, fuertemente interpenetrados, con contactos muy suturados y un tamaño comprendido entre 20 y 100 μm . Los cristales están elongados y presentan texturas orientadas con cierta tendencia concéntrica. Se observan estructuras nodulares constituidas por cristales de mayor tamaño en el borde de los nódulos y también finas venas de yeso fibroso secundario, que corresponden al paso de anhidrita a yeso. El porcentaje de cristales con extinción no uniforme (c.e.n.u.), de tamaño entre 100 y 500 μm , es menor que el de microcristales.

Los yesos alabastrinos mesocristalinos están constituidos por cristales de mayor tamaño, entre 400 a 1000 μm , con contactos menos suturados y un elevado porcentaje de cristales con extinción no uniforme.

Presentan abundantes venas centimétricas de yeso fibroso, rellenas por cristales de formas aciculares que se disponen perpendicularmente a las paredes de las venas. En estos yesos la estructura nodular es mucho mas gruesa.

Las rocas yesíferas se han torneado hasta proporcionarles forma esférica. El peso de cada una de las esferas oscila entre 4973 y 5177 g con diámetros medios de 16 a 16.2 cm a los que corresponden áreas superficiales comprendidas entre 802 y 820 cm². Las esferas de yeso se han preparado convenientemente de forma que pueden ser fácilmente suspendidas en el agua mediante la utilización de sirgas aceradas.

Los cursos de agua presentan valores medios de velocidad de flujo entre 0.3 y 1.1 m/s, de conductividad eléctrica entre 0.35 y 9 dSm⁻¹, de concentración de yeso en solución entre 0.02 y 1.23 gL⁻¹ e índices de saturación en yeso entre -0.33 y -2.1.

En cada curso y para verificar la incidencia de la textura de la roca yesífera en el proceso de disolución a igualdad de condiciones hidráulicas e hidroquímicas, se han seleccionado hasta un máximo de tres puntos para suspender las esferas de yeso. Esta situación se mantiene durante todo el estudio experimental, tanto a lo largo de la sección transversal como en la vertical.

Pensando que los distintos caracteres texturales producirían diferentes velocidades de disolución, la inmersión de las esferas, que se prolonga durante una hora, sigue una pauta rotacional entre los puntos y cursos de agua seleccionados, asegurándose así la representatividad y aleatoriedad de los resultados.

En cada una de las inmersiones se determina la velocidad de flujo, la temperatura, el pH y se recoge una muestra de agua para el análisis de parámetros hidroquímicos.

Después de cada ensayo se observa la evolución de la morfología de las esteras (aparición de pequeñas fracturas, poros, etc.) y de los caracteres texturales en lupa binocular, y transcurridas 16 horas de secado de las esteras al aire, se controla la pérdida de peso y se cuantifica la velocidad de disolución del yeso producida por unidad de superficie y tiempo, que se expresa en $\text{g/m}^2\text{h}$.

3.- RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En el Cuadro 1 se recogen los resultados de velocidad de disolución de los yesos alabastrinos micro y mesocristalinos. En los yesos alabastrinos microcristalinos el valor promedio de velocidad de disolución es de $136 \text{ g/m}^2\text{h}$, con valores mínimo y máximo de 69 y $241 \text{ g/m}^2\text{h}$. En los yesos alabastrinos mesocristalinos se han obtenido mayores velocidades de disolución que alcanzan los $174 \text{ g/m}^2\text{h}$, con valores mínimo y máximo de 88 y $302 \text{ g/m}^2\text{h}$. La media aritmética de las diferencias de las velocidades de disolución entre los yesos meso y microcristalinos es de $39 \text{ g/m}^2\text{h}$.

En el estudio de disolución realizado, y a igualdad de condiciones experimentales, se han constatado diferencias en las velocidades de disolución de los yesos en función de sus caracteres texturales. Estas diferencias son del orden del 22% superiores en los yesos mesocristalinos respecto de los microcristalinos.

Cuadro 1.- Velocidades de disolución de los yesos alabastrinos micro
y mesocristalinos.

VELOCIDAD DE DISOLUCION DE YESOS ALABASTRINOS g/m ² h		
microcristalinos	mesocristalinos	Δ
165.6	219.8	54.2
241.2	302.4	61.2
212.4	277.2	64.8
209.5	253.5	44.0
203.1	263.2	60.2
84.9	91.6	6.7
123.9	164.2	40.3
113.0	145.3	32.3
135.4	144.7	9.3
114.5	163.4	48.9
115.9	137.9	22.0
69.1	89.1	20.0
69.5	88.2	18.7
108.6	165.6	57.1
131.4	185.4	54.0
73.6	97.9	24.3
$\bar{x} = 135.7$	174.3	38.6

Las menores velocidades de disolución registradas en los yesos microcristalinos se deben a que los cristales están fuertemente interpenetrados y los planos de exfoliación son muy pequeños, lo que determina que la superficie de disolución sea el propio borde de los nódulos sin que haya penetración de agua a través de los contactos entre los cristales.

En los yesos mesocristalinos, el mayor tamaño de los cristales, su heterometría y el menor grado de trabazón intercristalino, multiplica las superficies de disolución, entre las que además de las propias caras de los cristales, se incluyen las de contacto intercristalino y las de los planos de exfoliación de los cristales, que en los yesos mesocristalinos son de considerable tamaño. Además, los contactos intercristalinos y los planos de

extolación constituyen vías de penetración de agua que favorecen la desagregación física de los cristales, con lo que se incrementa la rugosidad de la superficie y se produce un aumento notable del área superficial.

Por otra parte, los cristales con extinción no uniforme presentan estructuras cristalográficas imperfectas, con abundantes inclusiones líquidas y numerosas discontinuidades en su estructura cristalina (MANDADO, 1987), y en consecuencia tienen mayor facilidad para disolverse. Por tanto, el mas alto contenido de c.e.n.u. en los yesos mesocristalinos respecto de los microcristalinos, incide también en las mayores velocidades de disolución producidas en los primeros.

Las variaciones observadas en las velocidades de disolución del yeso, no se pueden achacar a la mas intensa velocidad de flujo que ocasionaría la disgregación mecánica de la roca, ni tampoco a un proceso físico de desmoronamiento producido en los sucesivos períodos de inmersión, lo que al final de la experimentación supone un mayor tiempo de contacto de los yesos con el agua.

Puesto que el desarrollo de microfisuración y la existencia de finas intercalaciones de materiales lutíticos y/o margo-cálcareos es común en los dos tipos texturales estudiados, se confirma la incidencia del carácter textural del yeso en el proceso de disolución, y ya que este hecho se ha verificado, aún cuando las texturas son relativamente similares, se pueden deducir fácilmente las consecuencias cuando las diferencias texturales sean mas acusadas.

BIBLIOGRAFIA

- APPELO, A.J.; H.E. BEEKMAN y A.W. OOSTERBAAN. 1984. Hydrochemistry of springs from dolomite reefs in the southern Alps of northern Italy. In: Hydrochemical balances of freshwater systems. Proc. Uppsala Symposium. 1984. Ed. E. Eriksson. IAHS- AISH Publication 150: 125-138.
- BARTON, F.M. y N.M. WILDE. 1971. Dissolution rates of polycrystalline samples of gypsum and orthorhombic forms of calcium sulphate by rotating disc method. Transactions of the Faraday Society. 67:3590-3597.
- CAMPBELL, A.N. y N.S. YANICK. 1932. The wellknown affect of particle size in solubility in the case of sypsum. Transac. Faraday Society. 28: 657-661.
- CRABTREE, R.W. y S.T. TRUDGILL. 1984. The use of gypsum spheres for identifying water flow routes in soils. Earth Surface Processes and Landforms. 9: 25-34.
- HARDIE, L.A. 1967. The gypsum-anhydrite equilibrium at one atmosphere pressure. American Mineralo. 52: 171-199.
- HESSE, P.R. 1974. Some studies on gypsum and gypsic soils. Appendix 6: Some factors affecting solubility of gypsum. FAO/Euphrate pilot irrigation project. AGONISF/SYR-522/72-79.
- KEMPER, W.D.; J. OLSEN y C.J. DEMOOY. 1975. Dissolution rate of gypsum in flowing water. Soil Science Society America Proceedings. 39: 458-464.
- KEREN, R. e I. SHAINBERG. 1981. Effect of dissolution rate on the efficiency of industrial and mined gypsum in improving infiltration of a sodic soil. Soil Science Society America Journal. 45: 103-107.
- LIU, S.T. y G.H. NANCOLLAS. 1971. The kinetics of dissolution of calcium sulphate dihydrate. J. Inorg. Nucl. Chem. 33: 2311-2316.
- MANDADO, J. 1987. Las litofacies yesíferas del sector aragonés de la cuenca terciaria del Ebro. Petrogénesis y Geoquímica. Tesis Doctoral. Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza. 443 pp.
- MANDADO, J.; J. RODRIGUEZ VIDAL y J.M. TENA. 1984. La disolución de rocas evaporíticas: Un importante factor geomorfológico en el valle del Ebro. Cuadernos de Investigación Geografica. I. Coloquio sobre procesos actuales en Geomorfología. t X: 139-148.
- NERNST, W. 1904. Theorie der Reaktionsgeschwindigkeit in heterogenen Systemen. Z. Phys. Chem. 47: 52-55.

ESCORRENTIAS SUPERFICIALES PRODUCIDAS SOBRE SUELOS YESIFEROS SOMETIDOS A LLUVIA SIMULADA

F. ALBERTO Y A. NAVAS

U.E.I. de Edafología. Estación Experimental de Aula Dei. C.S.I.C.
Apartado 202. 50080 Zaragoza (España).

In this work we use rain simulation techniques to study the effects of heavy storms, typical in the Ebro medium valley, on the production of surface runoff from gypsiferous soils. Different rainfall intensities were applied to soils varying in slope, percentage of rocks at the surface, moisture and vegetation cover.

We found a clear relationship between the characteristics of surface runoff and some environmental factors, mainly soil slope and percentage of rocks at the surface. The runoff characteristics were dependent also on other factors, such as soil cover, initial moisture of soil and rain intensity.

1.- INTRODUCCION

El agua precipitada sobre la superficie de la tierra, puede discurrir por ella, acumularse sobre el suelo o bien infiltrarse. La relación entre la intensidad de la lluvia y la capacidad de infiltración será la que determine la cantidad de agua que penetrará en el suelo y la que por escorrentía directa alimentará los cauces superficiales (CUSTODIO y LLAMAS, 1976).

Si bien los modelos clásicos de infiltración, predicen la generación de escorrentía superficial únicamente cuando las intensidades de la lluvia exceden la capacidad de infiltración del suelo, KNAPP (1978) y KIRKBY (1978) señalan que ésta puede ocurrir a intensidades de lluvia por debajo

de la capacidad de infiltración en suelos estratificados, cuando la existencia de un horizonte inferior de reducida conductividad hidráulica limita la capacidad de almacenamiento de la capa superior.

La cantidad de escorrentía superficial depende de un conjunto de factores, que no son independientes entre sí, entre los que cabe destacar las precipitaciones, la topografía, la vegetación y el tipo de suelo.

Respecto a los factores que hacen referencia a las características del terreno, la cobertura vegetal produce la intercepción de la lluvia favoreciendo su infiltración. Es obvio, que tanto la especie como la densidad de la vegetación juegan un papel preponderante en los procesos de escorrentía superficial, como así han evidenciado LAFFORGUE y NAAH (1976), LAFFORGUE (1977) y CASENAVE (1982).

La pendiente del terreno, su microtopografía y longitud, influyen en el hecho de mantener durante mas o menos tiempo una lámina de agua sobre el suelo. PLOEY y BRYAN (1986) establecen relaciones entre el tiempo de desencadenamiento de la escorrentía y el ángulo de la pendiente, constatando que al incrementarse la pendiente el agua escurre mas rápidamente.

Otros factores que afectan a la escorrentía superficial se refieren a los caracteres propios del suelo. Entre ellos hay que destacar el tipo de suelo, la textura, la estructura, la existencia de anisotropía, el estado de humedad inicial, etc. Así las cantidades de escorrentía varían en función del tipo y propiedades del suelo (PONCE, 1975; HODGES y BRYAN 1982; PEPPER y MORRISEY, 1985).

La textura influye por sí misma y a través de su incidencia en la estabilidad de la estructura (PLOEY y POESEN, 1985). La presencia de horizontes con diferentes capacidades de infiltración, o la existencia de anisotropía con desarrollo de capas de diferente conductividad hidráulica,

afectan directamente a la escorrentía superficial, como así han constatado LAFFORGUE (1977), CASENAVE (1982), AGASSI et al. (1985) y BURT (1986), quienes además señalan que el estado de humedad inicial del suelo es un factor condicionante de su capacidad de infiltración y por tanto del desarrollo de escorrentía superficial.

En el otro grupo de factores que definen las características de las lluvias, destacan, fundamentalmente, la intensidad y duración de las precipitaciones. De forma genérica, se puede afirmar que si la intensidad de la lluvia es superior a la capacidad de infiltración, una vez saturado el suelo se producirá escorrentía, si por el contrario es inferior no se generará escorrentía, a menos que influyan otros parámetros.

En cuanto a la ocurrencia de las escorrentías superficiales en las regiones semiáridas, AGASSI et al. (1985) señalan que si bien en estas zonas la precipitación anual es baja, se producen grandes pérdidas de agua por escorrentía superficial. Así, en el Norte del Negev (Israel), con valores de precipitación media anual de 380 mm, similares a los existentes en la depresión media del Ebro, HILLEL (1967) registra cantidades de escorrentía del 30-50% del total de la lluvia caída sobre parcelas experimentales de 6 m², y del 5 al 20% en parcelas de 10 has segun datos de AGASSI y ARBEL (1981).

En las zonas áridas la influencia de la litología sobre la infiltración es muy marcada, habida cuenta de su estrecha relación con la densidad de la red de drenaje, por lo que cuando ésta sea muy densa, como es el caso de la depresión media del Ebro en la que las formaciones yesíferas centrales presentan un modelado en "bad-lands", la escorrentía superficial alcanzará mas rápidamente los cursos de agua.

Por ello, el objetivo de este estudio es determinar la producción de escorrentía superficial en distintas condiciones y tipos de suelos

yesíferos, tras la ocurrencia de episodios tormentosos de máxima intensidad, representativos de las características pluviométricas del sector central de la depresión del Ebro.

2.- METODO EXPERIMENTAL

El estudio se realiza en parcelas experimentales de dimensiones 1.25 x 1.25 m sometidas a lluvia simulada.

Atendiendo a los factores que inciden primordialmente en la producción de escorrentía se han seleccionado suelos yesíferos, que corresponden según la clasificación de KUBIENA (1952) a Syrosems calizos, Xerorendsinas y Seroosems, desarrollados sobre litofacies yesíferas masivas pertenecientes a la Formación Zaragoza. El porcentaje de rocosidad (R) asociada a cada tipo de suelo abarca desde el 0.2 % en Seroosems al 44% en Sysrosems.

Las parcelas presentan pendientes (p) con valores promedios de 4, 8 y 16%. La superficie de la parcela es lisa sin rugosidades o acanaladuras que faciliten o retarden la evacuación de la escorrentía.

Estos suelos presentan una vegetación natural leñosa (V), cuya distribución porcentual varía desde el 1% en Syrosems al 50% Seroosems.

Los ensayos se realizan en dos estados de humedad del suelo, seco y húmedo.

Las intensidades de lluvia seleccionadas de 48 (P48) y 58 (P58) mm/h, son representativas de las precipitaciones máximas de 15 minutos de duración, con un período de retorno de 10 años y un nivel de probabilidad de ocurrencia del 90%, correspondientes a episodios tormentosos producidos en el ámbito de la depresión media del Ebro.

El tiempo de aplicación de lluvia simulada sobre cada una de las parcelas es de 15 minutos. Las series de experimentación en cada parcela

comienzan con suelo seco y vegetación (SCV) y lluvia de 48 mm/h, para seguir por este orden con lluvias de 58 y 48 mm/h en condiciones sucesivas de suelo húmedo con vegetación (HCV) y sin vegetación (HSV) hasta completar cinco ensayos.

En cada ensayo el muestreo de la escorrentía se realiza a intervalos de tres minutos, totalizando 5 muestras por ensayo. Al finalizar la experimentación se registra la cantidad total de escorrentía (L) recogida, expresada en mm/h. El coeficiente de escorrentía (e) representa el porcentaje de precipitación que aparece como escorrentía, para su estimación se mide el volumen de agua aplicada en cada experimento.

3.- RESULTADOS

De las posibles alternativas para la expresión de los resultados de cada experimento, ya sea la estimación de la media aritmética de las cinco muestras, con lo que los valores así obtenidos se referirían al episodio tormentoso de 15 minutos de duración, o bien la consideración de la media aritmética de los valores de las cuatro últimas muestras, como expresión de una situación de equilibrio, se optó por esta última.

Los resultados de los 15 experimentos realizados en Syrosems y Xerorendsinas respectivamente y de los 21 correspondientes a Seroosems se recogen en el Cuadro 1.

Al inicio de la escorrentía se registran valores mínimos; no obstante, transcurridos los tres primeros minutos de su desencadenamiento, el proceso de escorrentía presenta una clara tendencia a la rápida estabilización de sus valores.

Las cantidades de escorrentía presentan una notable variabilidad entre parcelas de un mismo tipo de suelo. El valor medio mínimo (4.18 mm/h) se

Cuadro 1.- Media aritmética y desviación estandar de los valores de es-
correntía superficial (L) y coeficiente de escorrentía (e)
para las distintas condiciones de pendiente, rocosidad, vege-
tación e intensidad de precipitación de los suelos yesíferos
estudiados.

SYROSEMS

Ensayo:	p I	R I	V I	P mm/h	L mm/h	e
No.	I	s	I	s	I	s
1	8	0	28	0	4.63	0
2	8	0	28	0	4.63	0
3	8	0	28	0	4.63	0
4	8	0	28	0	.00	0
5	8	0	28	0	.00	0
6	4	0	44	0	2.22	0
7	4	0	44	0	2.22	0
8	4	0	44	0	2.22	0
9	4	0	44	0	.00	0
10	4	0	44	0	.00	0
11	16	0	29	0	1.00	0
12	16	0	29	0	1.00	0
13	16	0	29	0	1.00	0
14	16	0	29	0	.00	0
15	16	0	29	0	.00	0

XERORENDINAS

Ensayo:	p I	R I	V I	P mm/h	L mm/h	e
No.	I	s	I	s	I	s
1	4	0	2	0	4.68	0
2	4	0	2	0	4.68	0
3	4	0	2	0	4.68	0
4	4	0	2	0	.00	0
5	4	0	2	0	.00	0
6	8	0	6	0	5.17	0
7	8	0	6	0	5.17	0
8	8	0	6	0	5.17	0
9	8	0	6	0	.00	0
10	8	0	6	0	.00	0
11	16	0	9	0	11.62	0
12	16	0	9	0	11.62	0
13	16	0	9	0	11.62	0
14	16	0	9	0	.00	0
15	16	0	9	0	.00	0

SEROSEMS

Ensayo:	p I	R I	V I	P mm/h	L mm/h	e
No.	I	s	I	s	I	s
1	4	0	.20	0	50.00	0
2	4	0	.20	0	50.00	0
3	4	0	.20	0	50.00	0
4	4	0	.20	0	.00	0
5	4	0	.20	0	.00	0
6	4	0	.20	0	.00	0
7	4	0	.20	0	.00	0
8	8	0	.20	0	32.64	0
9	8	0	.20	0	32.64	0
10	8	0	.20	0	32.64	0
11	8	0	.20	0	.00	0
12	8	0	.20	0	.00	0
13	8	0	.20	0	.00	0
14	8	0	.20	0	.00	0
15	16	0	.20	0	34.68	0
16	16	0	.20	0	34.68	0
17	16	0	.20	0	34.68	0
18	16	0	.20	0	.00	0
19	16	0	.20	0	.00	0
20	16	0	.20	0	.00	0
21	16	0	.20	0	.00	0

produce en Syrosems SCV, 8% y el máximo (35.9 mm/h) en Seroosems HSV, 8%. No obstante, los rangos de variación de la escorrentía para los distintos tipos de suelos son bastante similares. En Syrosems oscilan entre 4.18 y 30.8 mm/h, en Xerorendsinas entre 18.9 y 31.7 mm/h y en Seroosems se alcanzan los mas altos valores que están comprendidos entre 20.3 y 35.9 mm/h. De forma generalizada y para todos los tipos de suelos, los valores medios máximos de escorrentía se producen en parcelas en estado húmedo y sin vegetación, y los mínimos en parcelas en estado seco y con vegetación.

Respecto al coeficiente de escorrentía, los valores medios mínimos de 0.08 y 0.16 se registran en Syrosems SCV y el máximo de 0.61 en Seroosems HSV, 8%. Los mayores coeficientes de escorrentía se producen en Seroosems, seguidos de Xerorendsinas y Syrosems.

De entre todos los experimentos con lluvia simulada, los seleccionados como referencia para unificar la situación experimental de partida, y poder establecer las funciones de relación con factores fisiográficos (pendiente, rocosidad) independientemente de los condicionantes biológicos (vegetación) o edáficos (humedad inicial), corresponden a los realizados en parcelas en estado húmedo y sin vegetación (HSV), de Seroosems, Xerorendsinas y Syrosems, que se identifican en el Cuadro 1 mediante un asterisco.

Para los 18 experimentos de referencia, y confirmando los datos de HILLEL (1967), la media aritmética y desviación estandar de la escorrentía superficial (mm/h) son, respectivamente, 26.7 y 6.6 para la lluvia de 48 mm/h y 28.4 y 5.7 para la de 58 mm/h, con una ordenación de valores de mínimo a máximo de 14.7 y 35.9 mm/h que varían directamente con la pendiente. La distribución de los valores del coeficiente de escorrentía confirma esta tendencia.

La realización de un test de significación de diferencias de las

medias aritméticas de escorrentía entre las 18 parcelas de referencia, a través de la *t* de Student (Cuadro 2), ha puesto de manifiesto que las parcelas de Syrosems 1 y 2 presentan valores medios de escorrentía significativamente diferentes de las restantes parcelas, ello es debido a los mas altos porcentajes de rocosidad en estas parcelas, y diferenciados de las otras. Entre las demás parcelas de Syrosems, Xerorendsinas y Seroosems predominan las situaciones de homogeneidad, y las diferencias de los valores medios de escorrentía están originadas fundamentalmente por la pendiente. Se puede afirmar, por tanto, que cuando las diferencias de porcentaje de rocosidad en los suelos yesíferos no son muy marcadas, la producción de escorrentía está fundamentalmente afectada por la pendiente.

El análisis de los resultados ha puesto de manifiesto que en la producción de escorrentía superficial concurren factores del medio físico y climáticos, cuya participación en el proceso se muestra en la regresión múltiple establecida.

$$L \text{ (mm/h)} = 17.6 - 0.217 R \text{ (\%)} + 0.416 p \text{ (\%)} + 0.170 P \text{ (mm/h)}$$

$$R = 0.700$$

El siguiente análisis de varianza muestra que la ordenación de factores con incidencia en el proceso de escorrentía, es de mayor a menor: la rocosidad, la pendiente y la intensidad de la precipitación.

FUENTE DE VARIACION	GRADOS DE LIBERTAD	SUMA DE CUADRADOS	MEDIA DE CUADRADOS	F
Regresión	3	304	101	4.4
R %	1	213	213	9.3
p %	1	77	77	3.4
P mm/h	1	13	13	0.6
Residual	14	322	23	
R ²	0.485			
Error s.	4.8			

Cuadro 2.- Similaridad estadística de las medias aritméticas de escorrentía superficial entre cada una de las parcelas en estado húmedo y sin vegetación.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	-	***	***	***	***	***	***	***	***	**	***	***	***	***	***	***	***	***
2			*	**	***	**	*	**	***	**	**	*	***	**	***	***	***	***
3				*	**	*	-	-	***	-	-	-	*	-	***	***	***	***
4					-	-	*	-	-	-	-	*	-	-	-	-	-	-
5						-	**	-	-	-	-	**	-	-	**	**	*	-
6							*	-	-	-	-	*	-	-	-	-	-	-
7								-	***	-	-	-	*	-	***	***	***	***
8									**	-	-	-	-	-	***	***	***	**
9										-	**	***	***	-	**	**	-	-
10		***	>	3.71							-	-	-	-	-	-	-	-
11		**		2.45	-	3.71						-	-	-	***	***	***	**
12		*		1.94	-	2.44							-	-	***	***	***	***
13		-	>	1.94										-	***	***	***	***
14	1- Syrosem	4%P48				7- Xerorendsina	4%P48			13- Serosem	4%P48				**	**	*	*
15	2- Syrosem	4%P58				8- Xerorendsina	4%P58			14- Serosem	4%P58							
16	3- Syrosem	8%P48				9- Xerorendsina	8%P48			15- Serosem	8%P48					-	-	-
17	4- Syrosem	8%P58				10- Xerorendsina	8%P58			16- Serosem	8%P48						-	-
18	5- Syrosem	16%P48				11- Xerorendsina	16%P48			17- Serosem	16%P48							-
	6- Syrosem	16%P58				12- Xerorendsina	16%P58			18- Serosem	16%P58							

El efecto de la vegetación se analiza mediante el establecimiento de regresiones lineales simples entre el porcentaje de cobertura vegetal y los valores de la diferencia de escorrentía en parcelas HCV y HSV (Figura 1). El predominio de valores negativos supone una mayor producción de escorrentía en parcelas HSV, tanto para cada una de las intensidades de precipitación como para ambas.

Como se muestra en la Figura 2, la producción de escorrentía es mayor en las parcelas HSV respecto de las HCV, este hecho que se constata en la regresión para ambas intensidades de precipitación, es aún mas acusado para la mayor intensidad de precipitación (P58), y refleja el efecto de retención de agua por la vegetación.

La regresión lineal entre los valores de escorrentía de parcelas HCV (x) y los producidos en parcelas SCV (y), para la intensidad de precipitación de 48 mm/h es $y = -4.25 + 0.83x$ ($r=0.756$, $SE=0.975$), y evidencia que el estado de humedad inicial del suelo condiciona fuertemente la producción de escorrentía que es significativamente inferior en las parcelas en estado seco.

5.- CONCLUSIONES

Para un episodio tormentoso y confirmando numerosos antecedentes bibliográficos, la producción de escorrentía se relaciona directamente con factores del medio físico, con una incidencia primordial de la rocosidad y la pendiente.

La cantidad de escorrentía varía directamente con la intensidad de la lluvia, de forma que un incremento de ésta en un 10 % supone un 3 % más de escorrentía superficial.

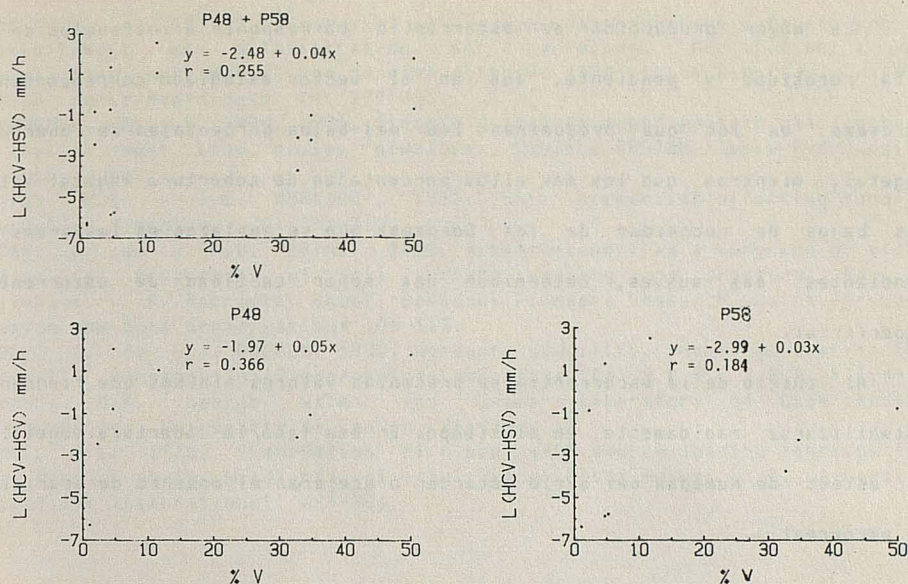


Figura 1.- Regresiones lineales entre el porcentaje de cobertura vegetal y los valores de la diferencia de escorrentía en parcelas HCV y HSV, para ambas intensidades de precipitación y para cada una de ellas por separado.

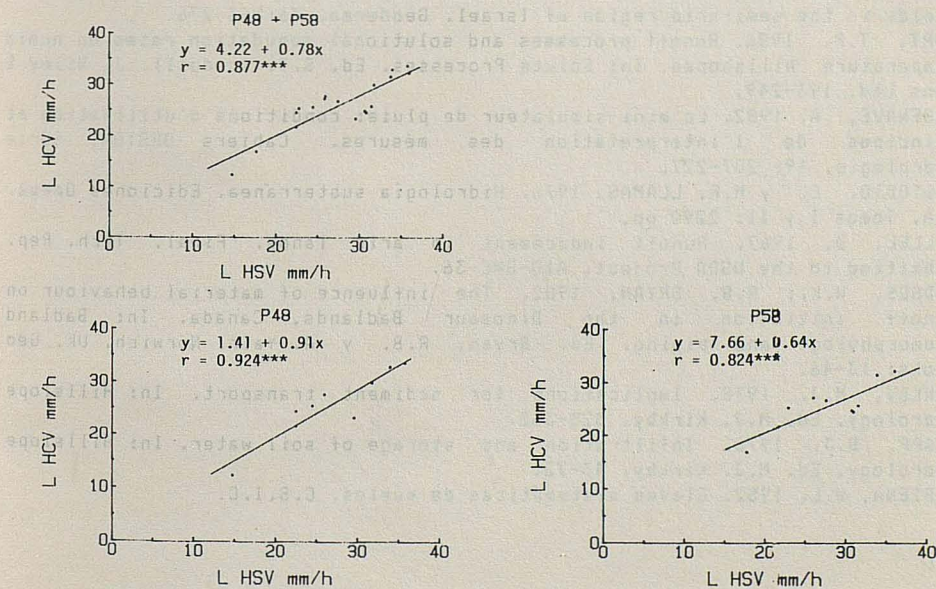


Figura 2.- Regresiones lineales entre los valores de escorrentía en parcelas HSV y HCV, para ambas intensidades de precipitación y para cada una de ellas por separado.

La mayor producción de escorrentía corresponde a los suelos de mas alta rocosidad y pendiente, que en el sector estudiado corresponden a Syrosems en los que predominan los mas bajos porcentajes de cobertura vegetal, mientras que los mas altos porcentajes de cobertura vegetal y los mas bajos de rocosidad de los Seroosems que se emplazan en las áreas de pendientes mas suaves, determinan una menor cantidad de escorrentía superficial.

Al inicio de la escorrentía se presentan valores mínimos que tienden a estabilizarse rápidamente en el tiempo. En esa fase, la cobertura vegetal y el estado de humedad del suelo retardan o aceleran el momento de aparición de escorrentía.

BIBLIOGRAFIA

- AGASSI, M. y S. ARBEL. 1981. Soil conservation activity survey in Israel Prelim. Rep. N° 10 and Progress Rep. N°s. 1,2,3,4 and 5, Isr. Min. Agric. Soil. Conserv. Drainage Div. Tel Aviv.
- AGASSI, M.; I. SHAINBERG y J. MORIN. 1985. Infiltration and runoff in wheat fields in the semi-arid region of Israel. *Geoderma*. 36:263-276.
- BURT, T.P. 1986. Runoff processes and solutonal denudation rates on humid temperature hillshopes. In: *Solute Processes*. Ed. S.T. Trudgill. J. Wiley & Sons Ltd. 193-249.
- CASENAVE, A. 1982. Le mini-simulateur de pluie: conditions d'utilisation et principes de l'interpretation des mesures. *Cahiers ORSTOM, Série Hydrologie*. 19: 207-227.
- CUSTODIO, E. y M.R. LLAMAS. 1976. Hidrología subterránea. Ediciones Omega. S.A. Tomos I y II. 2290 pp.
- HILLEL, D. 1967. Runoff inducement in arid lands. Final. Tech. Rep. submitted to the USDA Project, A10-SWC-36.
- HODGES, W.K.; R.B. BRYAN. 1982. The influence of material behaviour on runoff initiation in the Dinosaur Badlands, Canada. In: *Badland geomorphology and piping*. Ed. Bryan, R.B. y A. Yair. Norwich. UK. Geo Books: 13-46.
- KIRKBY, M.J. 1978. Implications for sediment transport. In: *Hillslope Hydrology*. Ed. M.J. Kirkby. 325-363.
- KNAPP, B.J. 1978. Infiltration and storage of soil water. In: *Hillslope Hydrology*. Ed. M.J. Kirkby. 43-72.
- KUBIENA, W.L. 1952. Claves sistemáticas de suelos. C.S.I.C.

- LAFFORGUE, A. 1977. Inventaire et examen des processus élémentaires de ruissellement et d'infiltration sur parcelles. Application a une exploitation méthodique des données obtenues sous pluies simulées. Cahiers ORSTOM. Serie Hydrologie. 14: 299-345.
- LAFFORGUE, A. y E. NAAH. 1976. Exemple d'analyse experimentale des facteurs de ruissellement sous pluies simulées. Cahiers ORSTOM- Serie Hydrologie. Abidjan. 32pp.
- PEPPER, R.G. y J.G. MORRISEY. 1985. Soil properties affecting runoff. Journal of Hydrology. 78: 301-310.
- PLOEY, J. de y R.B. BRYAN. 1986. Time-to-runoff as a function of slope angle. In: Assessment of soil surface sealing and crusting. Ed. F. Callebaut y D. Gabriels. Ghent, Belgium; Flanders Research Centre for Soil Erosion and Soil Conservation: 106-119.
- PLOEY, J. de y J. POESEN. 1985. Agregate stability, runoff generation and interrill erosion. In: Geomorphology and soils. Ed. R.K.S., R.R.A. Ellis-S. London, U.K. George Allen and Unwin Laboratory of Experimental Geomorphology. University of Leuven. Belgium.
- PONCE, S.L. 1975. Examination of a non-point source loading function for the Mancos Shale Wildlands of the Price River Basin, Utah. University Microfilms International. W-4-206.

ESTUDIO ECOLOGICO DEL RIO HUECHA

H. MARCO

Departamento de Bioquímica y Biología Molecular y Celular.
Facultad de Ciencias. Ciudad Universitaria.
50009 ZARAGOZA (España).

Ecological study of Huecha river.- In this paper, a study physical-chemical it is even as ecological of the zones Huecha river, where has certain water evaluable. Its compilent the species identificated during one year. In the four stations that have studied, it is set up a *Cladophoretum glomeratae* association in the H-3 and H-4 stations; a *Melosiretum arenariae* association all together with *Diatometo-Meridionetum* for station H-2 and finally the *Oscillatorietum* association, in the H-1 station.

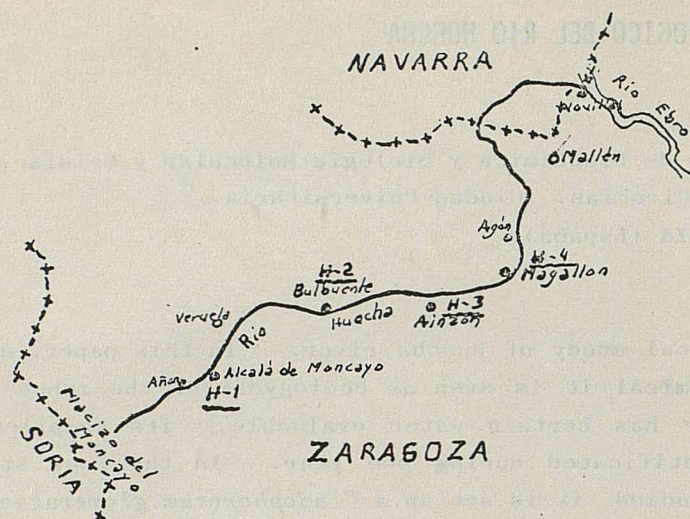
INTRODUCCION

Como continuación de una serie de trabajos que estamos realizando acerca de las características ecológicas de los ríos de Aragón, exponemos a continuación un estudio del río Huecha.

El río Huecha tiene su nacimiento en las estribaciones del Moncayo, próximo al pueblo de Añón. Discurre aproximadamente en dirección N.E., pasa por Alcalá de Moncayo y al llegar a lo que llaman los del lugar como el Vado, tuerce su curso hacia el Este, discurrendo su cauce, seco y pedregoso, paralelo a la Carretera Nacional 122, pasando por los pueblos de Bulbunte y Malejón.

El curso del río Huecha se desliza a lo largo de Ainzón y más tarde por las cercanías de Magallón, atraviesa la Carretera 122 de Zaragoza a Borja, discurrendo posteriormente por Agón, Frescalo, Mallén y Cortes, desembocando en el Canal Im-

perial y río Ebro en el pueblo de Novillas.



Esquema de la cuenca del río Huecha y ubicación de las estaciones muestreo.

Escala 1:400.000.

El cauce de éste río se encuentra totalmente seco en grandes tramos. Regato de agua que discurre por Alcalá de Moncayo e igualmente pobre a su paso por Bulbuciente, aun cuando a la salida del pueblo recupera algo de su excaso caudal por el aporte de un manantial del que se surten los moradores del pueblo. Se mantiene, a su paso por Malejón y se incrementa considerablemente en Ainzón, debido a dos manantiales importantes. Las aguas en éste pueblo son utilizadas para el riego de las huertas mediante azudes, por lo que al llegar a Magallón se reduce considerablemente su caudal, que al ser utilizadas sus escasas aguas para el riego, determina que a su paso por Agón aparezca un cauce totalmente seco. A partir de Mallén, debido al aporte de aguas diversas, aparece un caudal relativamente importante que se mantiene con alternativas varias hasta su desembocadura en el río Ebro.

MATERIAL Y METODOS

a) Campo de trabajo

Se han elegido como estaciones de muestreo, las que a continuación se citan:

Estación H-1

Se encuentra ubicada hacia la parte izquierda del puente, que salva el cauce seco del río Huecha, desde la carretera comarcal de Veruela de Añón, al pueblo de Alcalá de Moncayo. El amplio cauce totalmente seco se halla recubierto de cantos rodados y únicamente en su margen derecha, discurre un pequeño regato de agua que se corresponde a los comienzos del curso del río Huecha. El caudal es sumamente reducido, cauce muy estrecho, de unos 15 centímetros de profundidad como máximo. Se aprecian algunos ensanchamientos, donde domina un plocón de especies del género *Oscillatoria* así como gran cantidad de materia orgánica en descomposición. Las orillas muestran una vegetación poco desarrollada, estando representada especialmente por matas de *Lythrum salicaria* y *Xanthium strumarium*.

Estación H-2

Esta estación se sitúa en el pueblo de Bulbunte, aguas abajo del puente que salva el cauce del río Huecha, en la carretera comarcal de Bulbunte a la localidad de Ambel. Se trata de un amplio cauce, sumamente pedregoso y totalmente seco. La estación de muestreo se ha ubicado, aguas abajo, a unos 2 kilómetros del citado puente, localizándose en la margen derecha, un estrecho cauce de unos 20 centímetros de anchura, por donde discurre el agua actual de éste río. Este cauce vestigial se encuentra enmarcado por una frondosa vegetación representada por chopos, *Rubus fruticosus*, *Lythrum salicaria* en frondosas matas, floridas durante el mes de septiembre así como igualmente matas muy desarrolladas de *Mentha sylvestris*, igualmente floridas en dicho mes. Las zonas secas

del cauce, próximas a éste regato de agua, se hallan cubiertas por amplias matas de *Scirpus Holoschoenus*, así como igualmente por una densa vegetación representada por el *Sambucus nigra*.

Estación H-3

Se sitúa esta estación aguas arriba del puente que salva el río, en la carretera de Borja a Ainzón. Existe un amplio remanso que alcanza una profundidad de más de un metro. El caudal del río Huecha se encuentra incrementado por la presencia de un potente manantial que vierte sus aguas, a unos 500 metros antes del citado puente. Son aguas limpias y transparentes. Durante el mes de mayo, el fondo del citado remanso se halla totalmente invadido por el *Nasturtium officinale*. Entre las matas del *Nasturtium* o berro, se encuentran formaciones de *Callitriche stagnalis*. En las orillas, arbustos de *Sambucus nigra* y matas de *Lythrum salicaria*.

Estación H-4

Se ubica a la entrada del pueblo de Magallón, a un lado y otro del puente correspondiente a la carretera de Zaragoza a Borja.

El caudal se encuentra siempre muy disminuido, existiendo áreas de estancamiento. El cauce se halla totalmente invadido por el *Nasturtium officinale* y la parte central está en gran parte invadida por el *Callitriche stagnalis*.

A un lado y otro del puente y ocupando el área de aguas más o menos estancadas, aparecen masivas formaciones del *Iris pseudoacorus*, floridos durante el mes de mayo. Estas aguas son igualmente limpias y transparentes.

No se han establecido más estaciones de muestreo a partir de éste último lugar, ya que el curso aparece totalmente seco, en localidades como Agón y Fréscano mientras que a partir de Mallén, son aguas que no aportan caracteres ecológicos naturales de éste curso fluvial.

b) Técnicas de trabajo

Desde octubre de 1986 hasta finales de septiembre de 1987, se han llevado a cabo muestreos mensuales y en ocasiones quincenales, para estudiar posibles variaciones en los parámetros físico-químicos así como en la microflora y microfauna.

Para la determinación de la temperatura y oxígeno disuelto, se ha utilizado el aparato Beckman Mod. Fieldlab.

Los análisis químicos se han realizado en la Estación Experimental de Aula Dei, agradeciendo al Dr. Luis Montañés, su colaboración e interés en facilitarnos los parámetros químicos que nos interesaban.

En la identificación de los ejemplares correspondientes a la microflora y microfauna se han consultado los trabajos de MARGALEF (1953, 1955), DOSSET y MONZON (1988), CAMARA NIÑO (1951), KOSTE (1978), HARTMUT BICK (1972), KIEFER y FRYER (1978).

OBSERVACIONES Y RESULTADOS

a) Parámetros físico-químicos

Las determinaciones efectuadas entre 1986-1987 correspondientes al contenido en oxígeno, temperatura y pH, nos han proporcionado los siguientes datos medios:

Estación	H-1	H-2	H-3	H-4
Temperatura en C°	15	14	15	14
O ₂ en mgrs./l	4,3	7	4,1	1,2
pH	7	7,5	7	8

Se observa que en la estación H-2, donde el agua circula con relativa velocidad entre las piedras sumergidas, determina la existencia de un alto contenido en oxígeno, mientras que

la estación H-4, con un caudal muy reducido, acumulado en pequeños remansos, con gran cantidad de restos orgánicos, es responsable de un exiguo contenido en oxígeno.

El análisis químico de éstas aguas en las estaciones de muestreo nos han proporcionado los siguientes resultados.

Tabla I.- Composición de las aguas del río Huecha apreciada en las distintas estaciones.
Año 1986-1987.

	Alcalá de Moncayo H-1		Bulbunte H-2		Ainzón H-3		Magallón H-4	
	mgr./l	meq/l	mgr./l	meq/l	mgr./l	meq/l	mgr./l	meq/l
Carbonatos	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Bicarbonatos	3,104	5,09	3,02	4,96	3,23	5,36	3,19	5,23
Sulfatos	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cloruros	1,09	3,08	1,07	3,40	1,63	4,6	2,4	6,76
Calcio	0,64	3,21	0,804	4,02	1,186	5,93	1,99	9,96
Magnesio	0,126	1,05	0,116	0,97	0,232	1,94	0,738	6,15
Sodio	0,575	2,50	0,096	0,42	0,547	2,83	1,168	5,08
Conductividad eléctrica en mmhos	0,98		0,49		1,07		2,03	

Con los resultados analíticos obtenidos en las aguas que discurren por las distintas estaciones, se observa en primer lugar la ausencia total de sulfatos resultante de que el río Huecha no circula por terrenos yesosos.

Los bicarbonatos en concentraciones más bien bajas, se mantienen en concentraciones del orden de los 3 mgrs. por litro, experimentando una concentración más elevada en la estación de Bulbunte con una valor medio de 4,9 mgrs./l, posiblemente debido a su paso por una amplia zona caliza.

Las concentraciones catiónicas son más bien bajas, por lo que se trata de unas aguas marcadamente puras sin contami-

nantes procedentes de industrias, coincidente con las características de éste curso fluvial, cuyas aguas, especialmente las que circulan por la estación H-3 intensamente alimentadas por manantiales subterráneos y rápidamente utilizadas para riegos, no han tenido tiempo para alterar la pureza de las mismas.

El grado de pureza de éstas aguas viene conformada por la conductividad que oscila entre 0,98 mmhos o microsiemes y el de 2,03 mmhos que presentan las aguas de la estación H-4. En limnología se establece que una conductividad por debajo de 50 mmhos caracteriza a unas aguas muy puras.

CAMARA NIÑO (1950) confirma en sus observaciones de aguas mineromedicinales, la circunstancia de que las especies del género *Nasturtium*, son prácticamente incompatibles en aguas que contengan sulfatos, lo que representa un indicador biológico-químico, por la circunstancia de que las aguas del río Huecha al no presentar sulfatos, sean responsables de un desarrollo masivo del *Nasturtium officinale*, como hemos podido observar, particularmente en las estaciones H-3 y H-4.

b) Microflora característica

A continuación se exponen las formas vegetales pertenecientes al grupo de Algas que han sido detectadas a lo largo de un año de observaciones.

Cianoficeas

Género GLOEOCAPSA

Sobre la superficie de las piedras sumergidas correspondientes a la estación H-2 se han encontrado grandes cantidades de la especie *Gloeocapsa Juliana*, cuyas células miden 4 micras.

Género GOMPHOSPHAERIA

Entre el mucílago gelatinoso que se sitúa sobre la superficie de las piedras sumergidas, se ha detectado en todas las

estaciones de muestreo, la presencia de unas células más o menos cuneiformes, que se corresponden con la especie *Gomphosphaeria lacustris*, muy típica en aguas eutróficas. MARGALEF (1983) corrobora éste carácter eutrófico en ésta especie, coincidente con un pH situado en un valor entre 7 y 8.

Género APHANIZONENON

Entre las masas celulares correspondientes al género *Gomphosphaeria*, aparecen unas células cilindroideas, agrupadas en cortos tricomas, representantes de la especie *Aphanizomenon flosaquae*, propia de aguas eutróficas. En las aguas del río Huecha ofrecen un marcado desarrollo, indicativo del carácter poco mineralizado que tienen las mismas, hecho comprobado por el análisis químico.

Género OSCILLATORIA

En todas las estaciones se han detectado dos especies, *Oscillatoria splendida*, en tenues filamentos de 2 micras de diámetro y la *Oscillatoria irrigua*, con filamentos de 5 micras de diámetro. En las estaciones H-2, H-3 y H-4 aparecen muy dispersas, pero en cambio la estación H-1 ofrece una masiva y copiosa masa de éstas dos especies, que dominan de tal forma, que han hecho desaparecer a otras algas filamentosas, constituyendo por tal circunstancia un plocón fundamental del género *Oscillatoria*. Este tipo de plocón se encuentra asociado en aguas con un contenido más bien bajo de oxígeno (ésta estación ofrece una media de 4,3 mgrs./l) correspondiendo a un medio marcadamente mesosaprobio.

Género PHORMIDIUM

Este género se nos muestra tapizando la superficie de las piedras sumergidas, particularmente en las estaciones H-1, H-2 y H-3. Posiblemente se trate de la especie *Phormidium homoeotrichus*. Con una representación mucho menor, se ha identificado en las citadas estaciones, el *Phormidium subfuscum*.

Género PLEUROCAPSA

La especie identificada ha sido la *Pleurocapsa minor* y únicamente en la estación H-1, apareciendo entre los filamentos del plocón *Oscillatoria*. Son paquetes celulares, con células de 6-7 micras.

Género SPIRULLINA

Únicamente se ha encontrado y en cantidades reducidas, la especie *Spirulina minor* en las estaciones H-1 y H-2.

Diatomeas

Este grupo de algas se encuentra ampliamente representado en las aguas del río Huecha. DOSSET y MONZON (1888) realizaron estudios acerca de las Diatomeas existentes en arroyos y fuentes del Moncayo, aun cuando no cita recolecciones en el río Huecha.

En las estaciones H-2 y H-4 son muy abundantes las especies de *Navicula cryptocephala*, *N. elliptica* y *N. cuspidata*. Lo son igualmente el *Ceratoneis arcus*, *Fragillaria staurosira* y *F. mutabilis*, así como *Diatomea hiemale* y *Surirella elegans*.

En la estación H-2 aparece en forma dominante, el género *Melosira* cuyos filamentos se agrupan en tramas densas. Se han detectado tres especies, una más bien dominante, representada por la *Melosira arenaria* (lámina I, fig. c), seguida en importancia por los filamentos de *Melosira varians* (lámina I, fig. a) y en menor proporción *Melosira roeseana*. Igualmente en la estación H-2 aparece ampliamente representado el género *Meridion* con el *Meridion circulare* (lámina I, fig. b) y *M. circulare* var. *constrictum*.

A continuación se expone una lista de las especies detectadas en las cuatro estaciones de muestreo.

Achnanthes affinis
A. lanceolata
A. minutsi
Amphiprora allata
Amphora sp.
Amphora ovalis
Asterionella formosa
Ceratoneis arcus
Cymatopleura solea
Cymbella cymbiformis
C. prostrata
Denticula tenuis
Diatoma hiemale
D. vulgare
Encyonema caespitosa
E. gracilis
Epithemia argus
Eunotia arcus
Fragillaria staurosira
F. mutabilis
Gomphonema constrictum var.
 Capitatum
G. intricatum
G. olivaceum
Gyrosigma acuminatum
Melosira varians
M. roseana
M. arenaria
Meridion circulare

Meridion circulare var.

constrictum
Navicula borealis
N. cuspidata
N. cryptocephala
N. elliptica
N. limosa
N. oblonga
N. pusila
N. radiosa
N. rhynchocephala
N. sphaerophora
N. subcapitata
N. viridis
N. vulgaris
Nitzschia acicularis
N. hungarica
N. linearis
N. sigmoidea
N. sinuata
Pleurosigma attenuatum
Pinnularia viridis
Stauroneis anceps
Surirella elegans
S. ovalis
S. ovata
S. spiralis
S. ulna
Tabelaria flocculosa

Cloroficeas

Género APHANOCHAETE

Alternando con filamentos de *Ulothrix zonata* y más bien poco abundante y exclusivamente en la estación H-4, se ha de-

tectado la presencia de la especie *Aphanochaete repens*. MARGALEF (1983) establece que normalmente las especies de éste género se asocian con *Cladophora* y en aguas alcalinas por lo que en éste caso, se trataría de una adaptación no solo en lo que respecta a la composición de éstas aguas sino en su asociación con el género *Ulothrix*.

Género CLADOPHORA

Salvo en las estaciones H-1 y H-2, el género constituye la forma dominante del plocón de éstas aguas, representada por la especie *Cladophora glomerata*, que alterna con *Cladophora fracta*, esta en menor profusión ya que es más bien propia de aguas alcalinas. *Cladophora glomerata* es forma propia de aguas detenidas y remansadas, como ocurre muy particularmente en la estación H-4.

Género COELASTRUM

En la estación H-2 se han encontrado cantidades abundantes de la especie *Coelastrum microporum*, propio de aguas eutroficas.

Género EUDORINA

Muy dispersa, se han detectado colonias de *Eudorina elegans*.

Género GLOEOCYSTIS

Masas gelatinosas de ésta Tetrasporal, se han hallado exclusivamente en la estación H-4, de especie no identificada.

Género HORMIDIUM

Bajo formas filamentosas agrupadas en masas gelatinosas, aparece el *Hormidium rivulare*, que tapiza la superficie de las piedras sumergidas.

Género KIRCHNERIELLA

En todas las estaciones se ha encontrado, aun cuando en presencia reducida, formas coloniales correspondientes a la especie *Kirchneriella obesa*.

Género STIGEOCLONIUM

Las especies de éste género son consideradas como especies resistentes en aguas marcadamente polucionadas, FRANCKE y TEN CATE (1980). La especie identificada es *Stigeoclonium protensum* que se ofrece en tramas más o menos ramificadas. Se desenvuelve especialmente en las márgenes correspondientes a las estaciones H-3 y H-4 así como en los lugares en donde se aprecian rastros del ganado que se ha aproximado para beber.

Género ULOTHRIX

En la estación H-4 aparecen cantidades masivas de *Ulothrix zonata*, mostrando muchos de sus filamentos, formaciones zonares de tipo reproductor.

Conjugadas

Género EUASTRUM

En la estación H-3 se han recogido algunos ejemplares de una especie no identificada del género *Euastrum*, con células que miden 40 por 45 micras.

Género CLOSTERIUM

En las estaciones H-3 y H-4, en áreas que se corresponden a las aguas finas y circulantes, se ha detectado el *Closterium littorale*. Ejemplares muy escasos de *Closterium Leibleni* (lámina III, fig. b), con sus células marcadamente curvadas.

En la estación H-2 se detecta la presencia del *Closterium navicula* (lámina III, fig. e), de 25 micras de longitud con

sus característicos dos cloroplastos refringentes. También se ha identificado el *Closterium acerosum*, con sus típicas células rectas.

Género SPYROGIRA

El género *Spyrogira* falta totalmente en las estaciones H-1 y H-2, mientras que en las estaciones H-3 y particularmente en la H-4, mezclada con *Cladophora*, forma tupido tapiz de una especie de *Spyrogira* no identificada.

Xantoficeas

Género TRIBONEMA

Como afirma MARGALEF (1983), éste género ofrece una sistemática poco clara. Las especies de éste género se ofrecen bajo la forma de filamentos agrupados en masas amarillentas.

En las estaciones H-1 y H-2 se han encontrado relativamente abundantes, filamentos de *Tribonema viridis*, mientras que en las estaciones H-3 y H-4, ejemplares de *Tribonema vulgare*, solamente observados durante la primavera.

c) Microfauna característica

Rizópodos

Género AMOEBA

La especie *Amoeba proteus* se muestra muy esporádica y especialmente en áreas limosas de las orillas de la estación H-4.

Género HYALOSPHAENIA

Aun cuando éste género es propio de aguas marcadamente ácidas y en áreas turberales, la presencia de escasos ejemplares de la especie *Hyalosphaenia papilio* en la estación H-4 y en aguas encharcadas próximas al regato fluvial del río Huecha, nos hace suponer la posible existencia de unas condiciones muy

localizadas que permiten el desarrollo de ésta especie.

Infusorios

Género COLPIDIUM

Se han encontrado dos especies, el *Colpidium colpoda*, localizado en las estaciones H-3 y H-4, indicador de medios típicamente polisaprobios y la especie *Colpidium campylum*, igualmente en las citadas estaciones, pero con pocos ejemplares.

Género DILEPTUS

Durante el mes de mayo y localizado en la estación H-3, se han encontrado masivas cantidades de *Dileptus anser*, que según LIEBMAN (1962) representa un organismo indicador oligosaprobio.

Género EUPLOTES

Este género se encuentra ampliamente representado en las estaciones H-3 y H-4, siendo muy abundante el *Euplotes charon* y *E. patella*. Esta última especie ha sido detectada muy especialmente entre restos vegetales en avanzado estado de descomposición, siendo considerado por KOLKWITZ (1950) como organismo indicador beta-mesosaprobio, aun cuando se trata de una especie con notable capacidad de adaptación a medios muy variables. Muy esporádico, se ha identificado el *Euplotes affinis* en la estación H-4.

Género GASTROSTYLA

Ampliamente distribuido en las estaciones H-2, H-3 y H-4 ha sido identificado el *Gastrostyla steini*, muy semejante a la *Stylonychia mytilus*, pero de tamaño muy superior, que alcanza las 320 micras de longitud. Esta especie ha sido considerada por diversos autores como propia de medios mesosaprobios.

Género LACRYMARIA

En la estación H-4 muy abundante durante la primavera, se desenvuelve masivamente la especie *Lacrymaria olor*, que para KOLWITZ (1950) se trata de un organismo indicador oligosaprobio.

Género LEMBUS

Este género, al igual que *Trochilia* y *Uronema* aparecen en cantidades considerables, característicos por sus rápidos movimientos y reducido tamaño, del orden de las 25 micras. La especie identificada es el *Lembus pusillus*, que prospera especialmente en áreas con restos vegetales. Para LIEBMANN (1962) esta especie representa un organismo indicador polisaprobio.

Género PARAMECIUM

Este género ofrece una distribución cosmopolita, hallándose representado por las especies *Paramecium caudatum* y *P. bursaria*. En la estación H-1 se ha detectado en cantidades relativamente considerables, el *Paramecium putrinum*, con unas características ecológicas muy discutibles, aun cuando se tiene a considerarlo como organismo indicador polisaprobio, como estableció LIEBMANN (1962).

Género SPIROSTOMUM

Este género se encuentra representado por el *Spirostomum* *teres*, característico por su gran tamaño y amplia y extendida vacuola terminal. Sus características biológicas, estudiadas por BICK (1968) son coincidentes con las ofrecidas por el río Huecha, muy especialmente con las estaciones H-3 y H-4. Es considerado como organismo indicador mesosaprobio KOLWITZ (1950) y se localiza en zonas ricas con restos vegetales en descomposición y por lo general alejado de áreas que reciben aguas residuales.

Género STYLONYCHIA

Ubicada en las estaciones H-3 y H-4 y en cantidades relativamente abundantes, la especie *Stylonychia mytilus* se desenvuelve a lo largo de los filamentos de *Ulothrix* y *Cladophora*. KOLWITZ (1950) considera a ésta especie como organismo indicador alfa-mesosaprobio/beta-mesosaprobio.

Género TROCHILIA

En la estación H-1 se detecta la especie *Throchilia minuta*, que en grandes cantidades se aprecian en la estación H-1. Es considerado por diversos autores como especie oligo-mesosaprobio.

Género URONEMA

Representa un género de los Infusorios sumamente abundante, que se mueven a grandes velocidades, con su cuerpo típicamente ovoidal. Son concurrentes en aguas que llevan sustancias orgánicas en descomposición. Ha sido identificado en todas las estaciones, pero siempre en lugares con restos vegetales. Posiblemente se trate del *Uronema marinum*, que según LIEBMANN (1962) es organismo indicador alfa-mesosaprobio.

Género UROLEPTUS

En la estación H-4 se ha observado la presencia del *Uroleptus piscis*. KOLWITZ (1950) lo considera como especie indicadora beta-mesosaprobio.

Género VORTICELLA

Este género está representado por la *Vorticella convallaria*, muy abundante sobre filamentos de *Ulothrix* y *Cladophora*. Se ha identificado igualmente la *Vorticella similis*, siendo ambas especies propias de medios oligo-saprobios. Muy esporádica se encuentra la *Vorticella campanula*.

Rotíferos

Género CEPHALODELLA

Este género se encuentra representado por la *Cephalodella gibba* (lámina II, fig. b), especie muy común, que se encuentra especialmente en medios donde abunda el alga *Cladophora fracta*, habiendo sido detectada en la estación H-4. Se trata de una especie muy común.

Género COLURELLA

Ha sido identificada la especie *Colurella bicuspidata* (lámina II, fig. c), poco abundante y solo recogida en las aguas de la estación H-3. Sus características ecológicas resultan cuestionables por autores diversos. MARGALEF (1983) la considera como propia de las aguas dulces, mientras que KOSTE (1978), la ha detectado en zonas litorales así como en aguas salobres. Por tal circunstancia debe ser considerada como especie de amplia capacidad adaptativa.

Género NOTHOLCA

Este Rotífero Brachionido se encuentra representado por la especie *Notholca acuminata* (lámina II, fig. a), organismo indicador eurihialino y estenotermo. Autores como MARGALEF (1983) y KOSTE (1978), coinciden en que el régimen alimenticio de ésta especie se basa en diatomeas y cloroficeas.

Género PHILODINA

La especie *Philodina roseola* ofrece un habitat muy amplio y ha sido detectada su presencia en el río Huecha. MARGALEF (1983) confirma su marcada adaptación a condiciones ambientales muy diversas.

Género TESTUDINELLA

Durante el mes de junio se han recolectado ejemplares co-

rrespondientes a *Testudinella clypeata*, localizados en la estación H-3. Se le considera como mesohalobio.

Gastroticos

Género CHAETONOTUS

En las aguas de la estación H-2 y especialmente durante el mes de julio, ha sido identificado, en cantidades relativamente abundantes, la especie *Chaetonotus larus*, que se desplaza entre las algas que tapizan las piedras sumergidas.

Copépodos

En las estaciones H-2, H-3 y H-4 se han identificado la presencia de algunos Copépodos desde los meses de abril al de agosto, exponiéndose a continuación sus formas representativas.

Género ERGASILUS

Se han encontrado formas lavarias correspondientes al género *Ergasilus* (lámina III, fig. d) de especie no identificada, mostrando éstas larvas un marcado fototactismo positivo.

Género EUCYCLOPS

Asociado al *Cladophoretum glomeratae* se han encontrado con relativa abundancia, larvas en el estado 4º naupliar de la especie *Eucyclops serrulatus* (lámina III, fig. a). Según MARGALEF (1953) se trata de una especie que tolera aguas muy diversas y que entra dentro de las características químicas de éstas aguas.

Género LERNAEA

Se han recogido formas larvarias correspondientes al estado naupliar de una especie del género *Lernaea* (lámina III, fig. c). Las formas larvarias que describe GRABDA (1963) son totalmente coincidentes con las encontradas en el río Huecha. YIN, LING, HSU, CHEN, KUANG y CHU (1963) han detectado hasta

cinco estados evolutivos de la forma naupliar.

Género THERMOCYCLOPS

Bastante abundante y en particular durante los meses de julio y agosto, se ha detectado la especie *Thermocyclops hyalinus*, cuyas características descritas por MARGALEF (1953) coinciden con los ejemplares encontrados en el río Huecha (lámina IV, fig. b). Esta especie se halla en zonas de aguas claras correspondientes a la estación H-4, entre la abundante vegetación del *Nasturtium officinale* y la alianza del *Cladophoretum glomeratae*.

Cladoceros

Género ALONA

En la estación H-4 se ha encontrado relativamente abundante la especie *Alona rectangula* (lámina IV, fig. a) que igualmente se encuentra asociada al *Cladophoretum glomeratae*. Es propia de aguas eutróficas.

Ostracodos

Género CYPRIDOPSIS

Muy extendido en los pequeños remansos del río Huecha, hemos detectado la presencia de la especie *Cypridopsis newtoni* (lámina IV, fig. c). MARGALEF (1983) afirma que las especies del género *Cypridopsis* son propias de aguas dulces con un pH situado entre 7 y 8. Esta especie se encuentra asociada al *Cladophoretum glomeratae* aun cuando MARGALEF (1983) la ha detectado sobre el *Cladophoretum crispatae*.

Anelidos

Género OPHIDONAIIS

En la estación H-3 se desenvuelven durante el mes de mayo una gran cantidad de individuos pertenecientes al género *Ophi-*

donais, de 8 mm. de longitud, con sus característicos haces dorsales representados por una larga y rígida cerda. Coinciden en áreas en las que predominan materias orgánicas más o menos descompuestas.

Género PRISTINA

En la estación H-4 se han identificado algunos ejemplares de la especie *Pristina rosea*, de color rosáceo, presentando en cada tabique, tanto dorsal como ventralmente varias cerdas.

Nematodos

Género MONONCHUS

Este género está representado por la especie *Mononchus longicaudatus*, muy extendido por los ríos de Aragón, MARCO MOLL y GASPAS (1979). Se ha encontrado algún ejemplar esporádico en las estaciones H-3 y H-4, pero en la estación H-1 aparecen cantidades masivas entremezcladas con el plocón formado por los filamentos del alga *Oscillatoria*.

Espiroquétidos

Unicamente en la estación H-1, alternando con la gran masa de Infusorios pertenecientes a los géneros *Trochila*, *Uronema* y *Lembus*, aparecen grandes cantidades de éstos espiroquétidos, que como indicábamos en nuestro trabajo del río Huerva, MARCO MOLL y GASPAS (1979) son siempre coincidentes con áreas de aguas residuales así como de una elevada cantidad de materia orgánica en descomposición.

DISCUSION

La composición de éstas aguas, ofrecen en el tramo que ha sido objeto de estudio, un contenido sumamente bajo en sales, por lo que el condicionamiento de la microflora y microfauna se deben a otros factores ambientales, como son muy es-

pecialmente el grado de luminosidad, caudal circulante y posible estancamiento de materias orgánicas en descomposición.

La estación H-1, en la que predomina un desarrollo masivo de algas pertenecientes al género *Oscillatoria*, representa una asociación tipo *Oscillatorietum*, con unos condicionamientos que caen dentro de un medio marcadamente mesosaprobio, como estable MARGALEF (1983) ante éstas características.

La estación H-2 viene condicionada por un desarrollo de la *Melosira arenaria*, que constituye el plocón fundamental, asociada a *Diatoma* y particularmente al género *Meridium*. Los condicionamientos de ésta estación nos determina a establecer una asociación *Melosiretum arenariae* juntamente con un *Diatometo-Meridionetum*. La presencia del organismo indicador *Gastrostila steni*, caracteriza a éste medio como mesosaprobio.

Las estaciones H-3 y H-4 con un predominio de *Cladophora glomerata* condiciona la asociación *Cladophoretum glomeratae* que juntamente con la presencia de organismos indicadores como *Dileptus*, *Charon*, *Spirostoma* y *Lacrimaria*, entre otros, condicionan unas características más bien de tipo oligosaprobio.

RESUMEN

En éste trabajo se realiza un estudio físico-químico así como ambiental de las áreas del río Huecha (Aragón), en donde existe un caudal relativamente apreciable.

Se recopilan las especies que han sido recolectadas e identificadas durante los muestreos efectuados en el período de un año y se establece finalmente, en las cuatro estaciones que han sido objeto de estudio la existencia en la estación H-1 de la asociación tipo *Oscillatorietum*; una asociación del tipo *Melosiretum arenariae* en conjunción con una tipo *Diatometo-Meridionetum* para la estación H-2, mientras que las estaciones H-3 y H-4 la asociación típica está representada por un *Cladophoretum glomeratae*.

REFERENCIAS

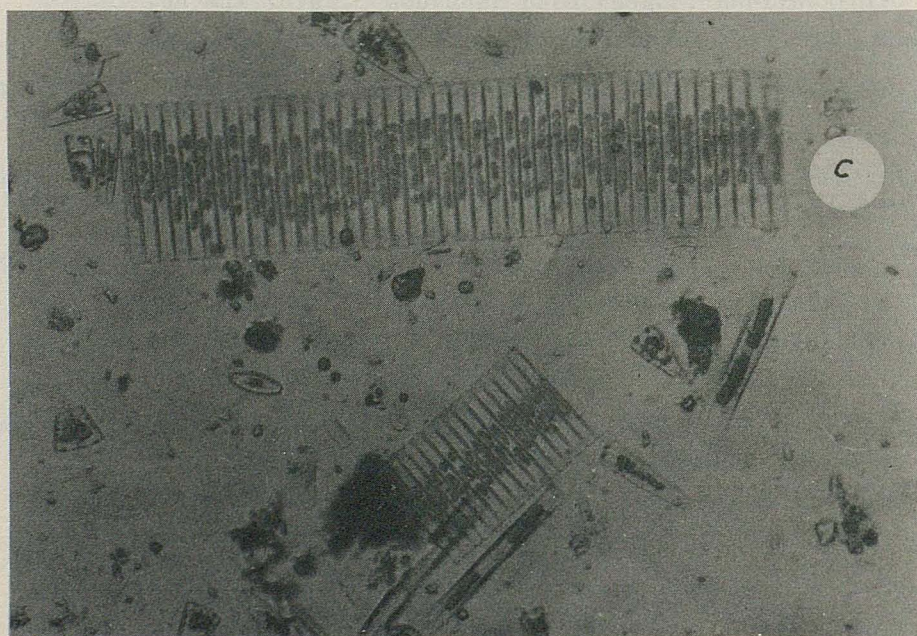
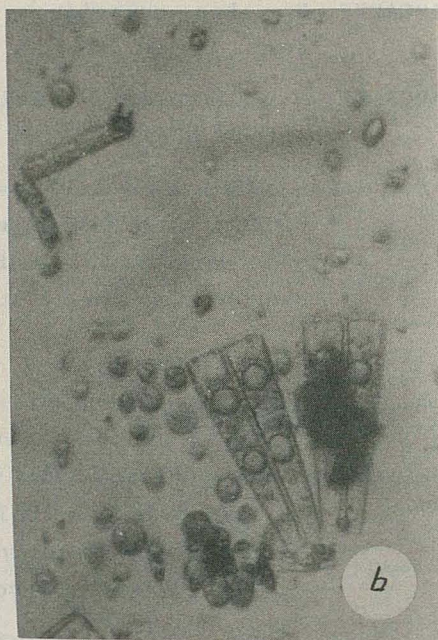
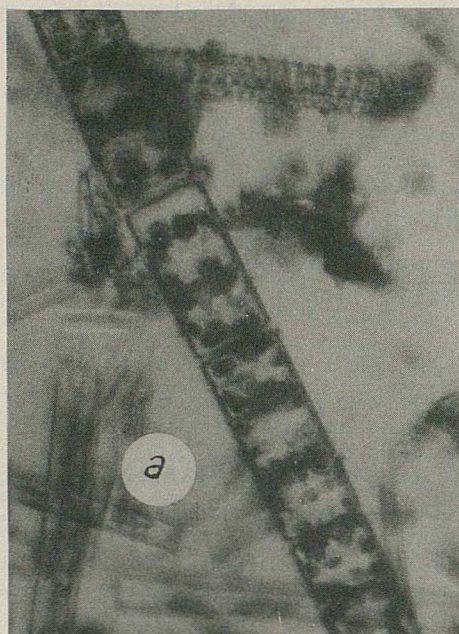
- BICK, H.- Autökologische und saprobiologische Untersuchungen an Süßwasserciliaten. *Hydrobiologia* 31, 77-89 (1968).
- CAMARA NIÑO, F.- Estudios sobre flora de aguas minerales. *An. J. Bot. Madrid* T-VI, 129-58 (1950).
- CAMARA NIÑO, F.- Diatomeas de las aguas minerales de Aragón. *Rev. Acad. Ciencias Zaragoza*, T-VI, 103-16 (1951).
- DOSSET y MONZON, J.A.- Datos para la sinopsis de las Diatomeas de Aragón. (1988).
- FRANCKE, J.A. and TEN CATE, H.J.- Ecotypic differentiation in response to nutritional factors in the algal genus *Stigeoclonium*. *Br. Chycol. Journ.* 15, 343-64 (1980).
- GRABDA, J.- Life cycle and morphogenesis of *Lernaea cyprinacea* L. *Acta Parasit. pol* 11, 169-98 (1963).
- KOLKWITZ, R.- Ökologie der Saprobien. *Schr. Reihe Ver. Wass. Boden-u Lufthyg* 4 (1950).
- KOSTE, W.- Rotatoria. Die Rädertiere Mitteleuropas begründet von Max Voigt. Gebrüder Borntraeger. Berlin-Stuttgart, 673 pags. (1978).
- KIEFER, F. y FRYER, G.- Das Zooplankton der Binnengewässer. Stuttgart, 380 pags. (1978).
- BICK, H.- Ciliated Protozoa. World Health Org. Geneva, 198 pags. (1972).
- LIEBMANN, H.- Handbuch der Frischwasser-und-Abwasser-Biologie; Biologie des Trinkwassers, Fischwassers, Vorfluters und Abwassers. 28888 end ed. Munich, Oldenbourg, vol. 1 (1962).
- MARCO MOLL, H. y GASPAR, P.- Estudio de la influencia de las aguas polucionadas sobre la población viviente en el río Huerva. *An. Est. Exp. Aula Dei* V-14 (3/4) 606-26 (1979).

- MARGALEF, R.- Los crustáceos de las aguas continentales ibéricas. Inst. Forest. Inv. y Exp. Madrid (1953).
- MARGALEF, R.- Los organismos indicadores en la limnología. Inst. Forest. Inv. y Exp. Madrid (1955).
- MARGALEF, R.- Limnología. Ediciones Omega. 1010 pags. Barcelona (1983).
- YIN, W.Y., LING, M., E.HSU, G., A.CHEN, I., S.KUANG, P., R.CHU, S.- Studies on the lernaeosis (*Lernaea*, Copepoda parasitica) of freshwater fishes of China. Acta Hydrobiol. sin nº 2, 48-117 (1963).

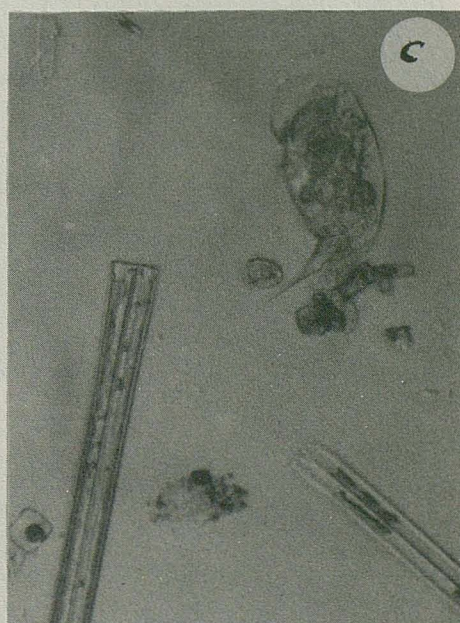
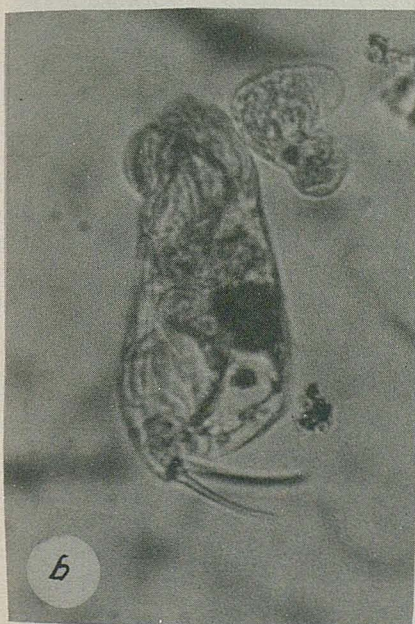
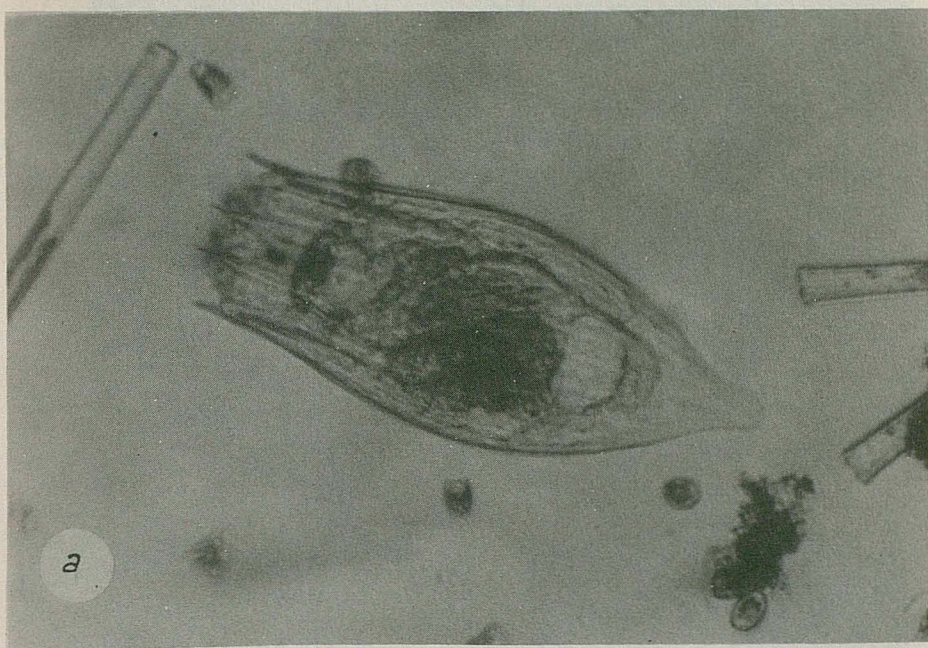
EXPLICACION DE LAMINAS

- Lámina I.- Formas típicas de las asociaciones existentes en la estación H-2 (Bulbiente), *Melosiretum rivulariae* y *Diatometo-Meridionetum*. a) *Melosira varians* (300 x); b) *Meridion circulare* (300 x); c) *Melosira arenaria*.
- Lámina II.- a) *Notholca acuminata* (300 x); b) *Cephalodella gibba* (300 x); c) *Colurella bicuspidata* (300 x).
- Lámina III.- a) Forma larvaria del *Eucyclops serrulatus* (300 x); b) *Closterium Leibleni* (300 x); c) Forma larvaria de *Lernaea* sp.; d) Forma larvaria de *Ergasilus* sp. (200 x); e) *Closterium navicula* (500 x).
- Lámina IV.- a) *Alona rectangula* (300 x); b) *Thermocyclops hyalinus* (200 x); c) *Cypridopsis newtoni* (200 x).

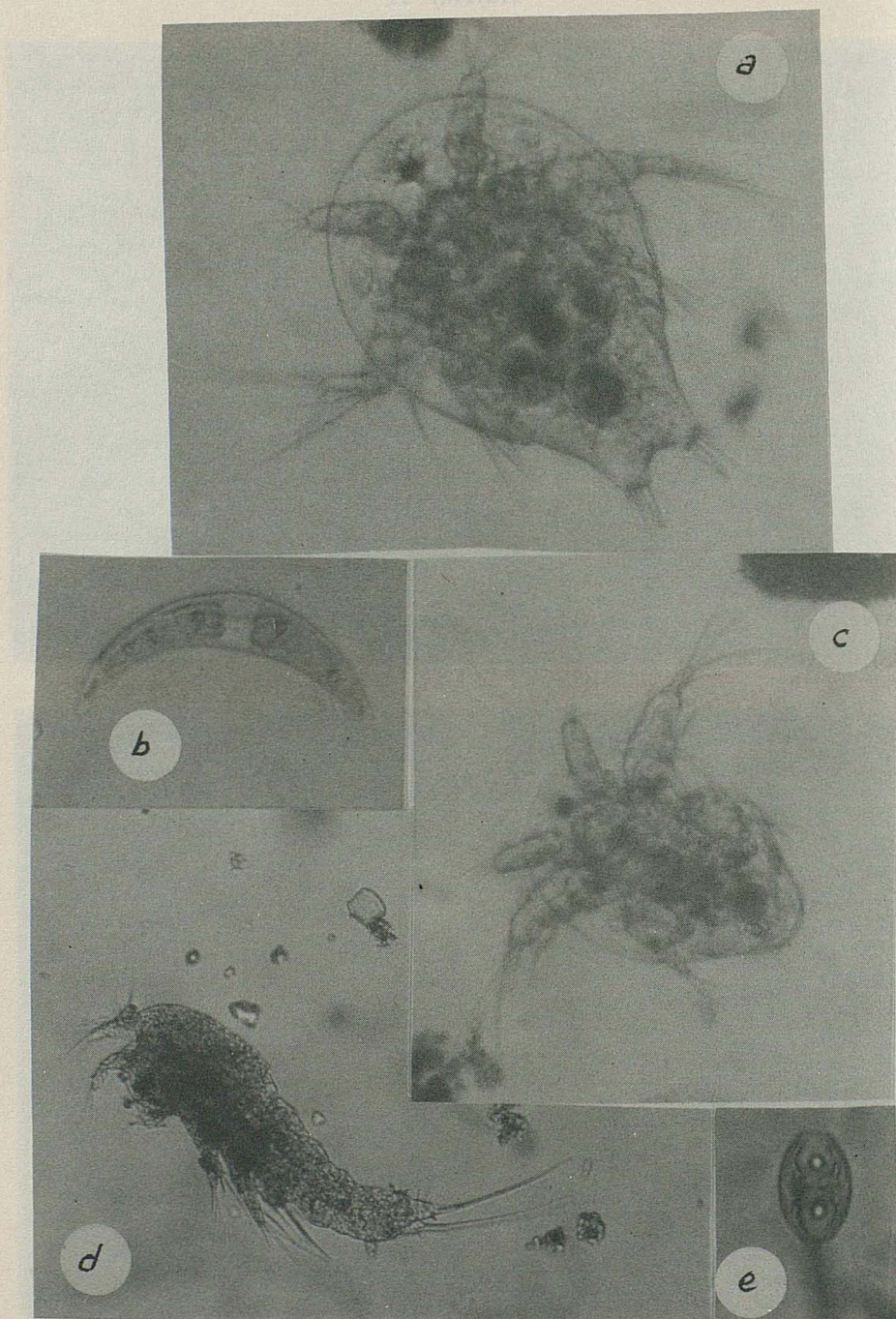
LAMINA I



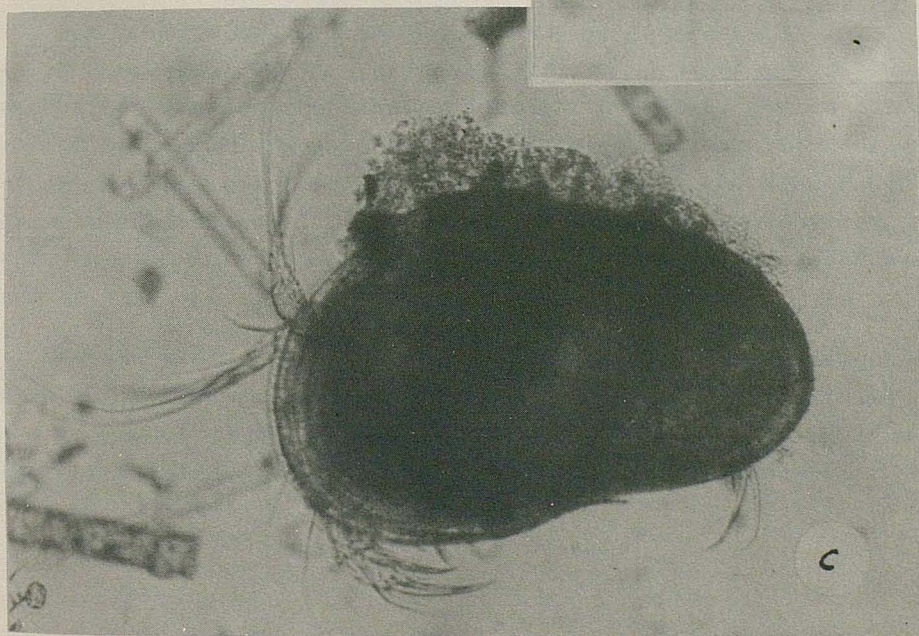
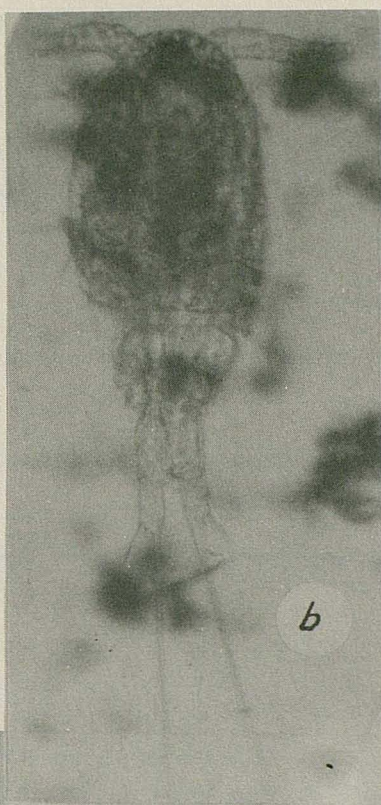
LAMINA II



LAMINA III



LAMINA IV



CONTRIBUCION A LA ALGOLOGIA DEL CURSO INFERIOR DEL RIO GALLEGO

H. MARCO

Departamento de Bioquímica y Biología Molecular y Celular.

Facultad de Ciencias. Ciudad Universitaria.

50009 ZARAGOZA (España).

MARCO MOLL, H. (1984).- Contribution to algologie of lower flow of Gallego river.

A research is made about the microfloral aspects of the waters of Gallego river.

The partial zone studied includes from Zuera until reaching the town of Zaragoza.

INTRODUCCION

Son numerosos los trabajos acerca de la presencia de algas en las aguas de la Península Ibérica, siendo uno de los autores que más han contribuido GONZALEZ GUERRERO, que en 1927 publicó un trabajo resumen de las algas en España. Es de resaltar que las observaciones se han orientado más bien hacia las aguas estancadas, aun cuando existen algunos realizados en cursos fluviales, como se ha hecho con el río Manzanares, PARDO (1935).

En los ríos aragoneses no hemos encontrado trabajo alguno, salvo el que en el río Huerva publicamos, MARCO MOLL (1979), por lo que el objetivo de éste opúsculo, es contribuir a un mayor conocimiento de la algología en los ríos aragoneses.

MATERIAL Y METODOS

a) Campo de trabajo

Se ha elegido el tramo inferior del río Gállego, que se extiende desde la entrada del pueblo de Zuera hasta su desembocadura en el río Ebro, sito en la propia ciudad de Zaragoza.

Las estaciones de muestreo elegidas han sido las siguientes:

Estación G-1

Se halla situada a la salida del pueblo de Zuera, bajo el puente de la carretera nacional Zaragoza-Huesca. Se trata de un cauce ocupado por rocas calizas, GONZALEZ MARTINEZ y ARRESE SERRANO (1977). Normalmente el río presenta una corriente tranquila, coincidente con el amplio meandro que rodea al pueblo de Zuera. Las aguas, salvo en ocasiones muy particulares, son limpias y transparentes.

Estación G-2

Ubicada a un kilómetro del pueblo de San Mateo de Gállego, a la salida de un meandro encajado. Las muestras se han tomado bajo el puente de la carretera vecinal que vá de la N-330 a Leciñena. El cauce del río en este tramo, se encuentra ocupado por gruesos cantos rodados. La corriente es algo intensa, siendo las aguas muy claras.

Estación G-3

Esta estación de muestreo se sitúa en el término municipal de Peñaflor, poco antes de llegar a los terrenos de la Cartuja de Aula Dei. Se trata de un amplio tramo, con aguas algo impetuosas, que normalmente exhiben una alta turbidez, fuertemente contaminadas como se indica en carteles prohibitivos. Presenta amplias zonas con cantos rodados sumamente gruesos.

Estación G-4

Esta área de muestreo se ubica unos metros antes de alcanzar el río Ebro. Son aguas muy contaminadas, turbias, con amplias zonas de aguas más o menos estancadas y putrefactas.

b) Técnicas de trabajo

Para la determinación del oxígeno disuelto se utilizó el aparato Beckman Mod. Fieldlab.

En la identificación de las especies se han consultado los trabajos de MARGALEF (1955), DOSSET y MONZON (1888) y CAMARA NIÑO (1951).

OBSERVACIONES Y RESULTADOS

a) Observaciones

Durante el año 1987 se han efectuado periódicamente toma de muestras con intervalos de un mes. Las variaciones en contenido de oxígeno, fueron prácticamente constantes a lo largo de las estaciones de muestreo y oscilaron en el orden de 8 p.p.m. El pH osciló entre 7-8.

b) Microflora característica

Las aguas del curso inferior del río Gállego ofrecen un amplio espectro de diversos tipos de algas, algunas de las cuales se ofrecen en las láminas que se adjuntan en el presente trabajo.

Cianoficeas

Género OSCILLATORIA

Este género abunda considerablemente en los lugares en donde se acumula el vertido de aguas residuales que conllevan la presencia de materia orgánica y parece ser que ofrecen un

importante papel en la depuración de éste tipo de aguas.

Especies detectadas son las siguientes:

<i>Oscillatoria limosa</i>	<i>Oscillatoria formosa</i>
<i>Oscillatoria animalis</i>	<i>Oscillatoria simplicissima</i>
<i>Oscillatoria tenuis</i>	<i>Oscillatoria nigra</i> .

Las especies *O. tenuis* y *O. nigra* han sido detectadas en la estación G-4, en donde el grado de contaminación de las aguas es más intensa, apareciendo especialmente la *O. nigra* bajo la forma de capas negruzcas.

Género PHORMIDIUM

Este género caracterizado por sus filamentos unidos entre sí por una masa gelatinosa, han aparecido exclusivamente en la estación G-1, particularmente en remansos existentes en el meandro de ésta zona del curso fluvial.

Las especies identificadas han sido:

<i>Phormidium subfuscum</i>	<i>Phormidium uncinatum</i>
<i>Phormidium inundatum</i>	<i>Phormidium cebennense</i> .

Género HYDROCOLEUS

En las aguas que discurren por la estación G-3 se ha encontrado una especie del género *Hydrocoleus*, posiblemente el *H. homoeotrichus*, que reviste los cantos rodados sumergidos en estas aguas, formando sobre la superficie de los mismos una capa verdosa.

Género SPIRULINA

Este género aparece representado por dos especies, la *Spirulina Jenneri*, representativa en zonas con abundancia en aguas residuales, acompañando a la *Oscillatoria nigra* y la *Spirulina major*, detectada en aguas limpias y de curso rápido.

Género RIVULARIA

En el cauce del río y orillas, correspondientes a las estaciones G-1 y G-2, se han recogido ejemplares de la *Rivularia dura*.

Género NOSTOC

En las estaciones G-1, G-2 y G-3 se ha registrado la presencia de dos especies pertenecientes a éste género, el *Nostoc rivulare* y el *Nostoc sphaericum*.

Género MERISMOPEDIA

Las formas coloniales de éste género se acumulan muy particularmente en las márgenes del río, correspondientes a las estaciones G-1, G-2 y G-3 con la especie *Merismopedia punctata*.

Euglenales

Así como en el río Huerva, MARCO MOLL (1979), la *Euglena viridis* se manifestaba de forma muy esporádica, en las aguas del río Gállego, aparece ampliamente representada en las estaciones G-1, G-2 y G-3.

Diatomeas

Como ocurre en todas las aguas, la mayor representación de algas y muy especialmente en lo que concierne al número de especies distintas, corresponde a las Diatomeas.

A continuación exponemos las Diatomeas encontradas en todas las estaciones de muestreo, indicativas de una perfecta adaptación a las distintas condiciones ambientales que ofrecen éstas aguas:

Achnanthes exigua

Achnanthes lanceolata

Amphora ovalis

Amphora ornata

Amphriprora paludosa

Amphriprora ornata

<i>Coconeis</i> sp.	<i>Melosira varians</i>
<i>Cyclotella</i> sp.	<i>Navicula rhynchocephala</i>
<i>Cyclotella striata</i>	<i>Navicula alíptica</i>
<i>Cymatopleura solea</i>	<i>Navicula gracilis</i>
<i>Cymbella prostrata</i>	<i>Navicula oblonga</i>
<i>Cymbella ventricosa</i>	<i>Navicula lanceolata</i>
<i>Cymbella</i> sp.	<i>Nitzschia elongata</i>
<i>Cymbella turgida</i>	<i>Nitzschia communis</i>
<i>Cymbella ventricosa</i>	<i>Nitzschia acicularis</i>
<i>Cymbella cymbiformis</i>	<i>Nitzschia apiculata</i>
<i>Denticula tenuis</i>	<i>Pinnularia viridis</i>
<i>Diatoma elongatum</i>	<i>Pleurosigma angulatum</i>
<i>Epithemia lorox</i>	<i>Pleurosigma elongatum</i>
<i>Epithemia turgida</i>	<i>Podocystis</i> sp.
<i>Eunotia arcus</i>	<i>Rhoicosphenia curvata</i>
<i>Gomphonema capitatum</i>	<i>Surirella ovalis</i>
<i>Gomphonema intricatum</i>	<i>Surirella biseriata minor</i>
<i>Gomphonema parvulum</i>	<i>Surirella striatula</i>
<i>Gomphonema subclavatum</i>	<i>Synedra ulna</i>
<i>Gomphonema clivaceum</i>	<i>Synedra pulchella</i>
<i>Gyrosigma acuminatum</i>	<i>Synedra affinis</i>
<i>Mastogloia smithii</i>	

En la estación G-2 se localizan la *Synedra acus* var. *radians*, así como la *Surirella linearis*.

Protococales

Este orden ofrece los siguientes géneros:

Género CHARACIUM

Este género se encuentra representado por la especie *Characium gracilis*, encontrada en las estaciones G-1 y G-2.

Género PEDIASTRUM

Únicamente en la estación G-1 se ha identificado, en for-

ma muy esporádica, una especie del género *Pediastrum*, con formas coloniales que obedecen a la expresión $1 + 6 + 11 + 16$ que se corresponde al *P. birradiatum*.

Género COELASTRUM

Las colonias globosas de éste género, se hallan representadas por la especie *Coelastrum morus*, recogido en las orillas de la estación G-2.

Género SCENEDESMUS

En todas las estaciones de muestreo, aparece una especie de éste género en la que no ha sido posible determinar la especie.

Género OOCYSTIS

En la estación G-4 se ha identificado la presencia de colonias pertenecientes al *Oocystis nodulosa*, que indican su adaptación a unas aguas estancadas y fuertemente contaminadas con elevadas cantidades de materia orgánica en descomposición.

Ulotricales

En el grupo de Ulotricales se han encontrado dos géneros: el género *Ulothrix*, con la especie *U. zonata*, ampliamente representada en todas las estaciones de muestreo y el género *Stigeoclonium*, representado por la especie *S. protensum*, que en grandes cantidades, se localiza en las aguas estancadas de la estación G-4, formando unos céspedes de consistencia mucoides en asociación con diversas especies de Diatomeas.

Conjugadas

Este grupo se encuentra ampliamente representado, habiéndose detectado los siguientes géneros:

Género CLOSTERIUM

Se ha identificado en la estación G-2 la presencia de la especie *Closterium Ehrenbergi*, mientras que en la estación G-4, en remansos marcadamente putrefactos, se desenvuelve el *Closterium striolatum*, de 350 micras de longitud, detectado en zonas turberales por GONZALEZ GUERRERO (1950).

Género COSMARIUM

En las estaciones G-1, G-2 y G-3 es muy abundante el *Cosmarium laeve*.

Género SPHAEROZOSMA

Salvo en la estación G-4, es relativamente abundante una especie no identificada perteneciente a éste género.

Género SPYROGIRA

El género *Spyrogira* se encuentra ampliamente representado, formando amplias masas en todas las estaciones del curso inferior del río Gállego.

Dada la dificultad de identificación de las especies de éste género, ya que no son suficientes los caracteres que nos pueden aportar las células vegetativas, si se ha podido determinar la existencia de dos especies, cuyas fotografías pueden apreciarse en la Lámina III, que aparentemente difieren en la separación de las vueltas de las espiras de los dos cloroplastos acintados.

Aparte de estas dos especies, se ha detectado la especie *Spyrogira tenuissima*.

Género MICRASTERIA

Muy dispersa, se ha identificado a la *Micrasteria denticulata*.

DISCUSION

De las observaciones realizadas y que han sido expuestas anteriormente, puede deducirse que no existen amplias divergencias con relación a nuestras observaciones realizadas a lo largo del curso del río Huerva, MARCO MOLL (1979).

Es de resaltar que la gran abundancia de la *Cladophora fracta* que revestían los cantos rodados sumergidos en las aguas del río Huerva, se encuentra sustituida muy especialmente por el *Hydrocoleus homoeotrichus* así como por diversas especies del género *Spyrogira*, y de la especie *Stigeoclonium protensum*, predominante en la estación G-4.

Existe una marcada coincidencia entre las zonas fuertemente contaminadas del río Huerva con las del río Gállego, en lo referente a la *Oscillatoria nigra* y *O. tenuis*, Cianofíceas que muy posiblemente sean indicadoras de éste tipo de aguas.

Igualmente resulta muy significativo que las colonias del *Oocystis nodulosa* se desarrollen igualmente en áreas de aguas muy contaminadas y elevada cantidad de materias orgánicas en descomposición. Todas estas especies citadas, caen dentro del mundo polisaprobio a los cuales debe corresponder una microfauna característica.

Dentro de las Diatomeas, la *Eunotia arcus* con una longitud de 60 micras, se halla especialmente en la estación G-2, siendo indicadora de aguas finas, que se corresponden al estado de esas aguas en ese tramo del río. DOSSET (1888) la identifica como *Ceratoneis arcus* y la encuentra en aguas finas y claras de los arroyos y torrenteras de Panticosa.

La especie *Synedra arcus* var. *radians*, con sus 150 micras de longitud, que se ofrece en agrupaciones radiantes, es frecuente en las aguas limpias de las estaciones G-1 y G-2.

Aun cuando MARGALEF (1955) considera a la especie *Masto-*

gloia Smithii como especie indicadora de un medio halófilo, el haberse detectado ésta especie en todas las estaciones de muestreo, podría indicarnos un caso de adaptación al tipo de concentración salina de éstas aguas.

El género *Amphiprora* se encuentra representado por la especie *Amphiprora ornata*, existente en todas las estaciones de muestreo. Igualmente se presenta con poca abundancia, la *Amphiprora padulosa*. Aun cuando ésta especie, según CAMARA NIÑO (1951) es más bien representativa de aguas salobres, como las de Mediana de donde la cita, su presencia en las aguas del río Gállego, indica un posible caso de adaptación. Esta especie es utilizada, juntamente con la *Asterionella formosa* y la Cianofícea *Mycrocystis aeruginosa* en semicultivos continuos, según trabajos de HOLM y ARMSTRONG (1981), ya que resultan típicas especies indicadoras en las variaciones del SiO_2 y de los fosfatos así como igualmente del nitrógeno inorgánico, por lo que sería aconsejable llevar a cabo experiencias de laboratorio en el sentido de establecer una relación en las variaciones del SiO_2/PO_4 que pueden existir en éstas aguas.

RESUMEN

Este trabajo tiene por objeto contribuir a un mayor conocimiento de la microflora de las aguas fluviales de Aragón, correspondiendo éste estudio al curso inferior del río Gállego, desde Zuera hasta su desembocadura en Zaragoza.

Aparte de la descripción y enumeración de las especies encontradas, se apunta la posible relación que puede existir entre algunas especies y las condiciones ambientales de las estaciones de muestreo.

BIBLIOGRAFIA

- CAMARA NIÑO, F.- Diatomeas de las aguas minerales de Aragón.
Rev. Acad. Ciencias Zaragoza T-VI, 103-116 (1951).
- DOSSET Y MONZON, J.A.- Datos para la sinopsis de las Diatomeas de Aragón. (1888).
- GONZALEZ GUERRERO, P.- Contribución al estudio de las algas y esquizofitas de España. Trabajo del Museo Nacional de Ciencias Naturales. Serie Bot. nº 22 (1927).
- GONZALEZ GUERRERO, P.- Algas y Cianofíceas de la Sierra de Gêrês. Agronomía Lusitana, vol. XII pag. 15-76 (1950).
- GONZALEZ MARTINEZ, J. y ARRESE SERRANO, F.- Las terrazas del río Gállego en su curso medio inferior. I. Aspectos morfológicos y sedimentológicos. Rev. Acad. Ciencias Zaragoza, 32 1-2, 109-123 (1977).
- HOLM, N.P. and ARMSTRONG, D.E.- Role of nutrients limitation and competition in Controlling the poblations of *Asterionella formosa* and *Mycrocystis aeruginosa* in semicontinuous culture. Limnol. Oceanogr. 26, 622 (1981).
- HOLM, N.P. and ARMSTRONG, D.E.- Effects of Si:P concentration ratios and nutrient limitation on the cellular composition and morphology of *Asterionella formosa* (Bacillariophyceae). J. Phycol. 17, 420 (1981).
- MARCO MOLL, H. y GASPAR SANMARTIN, P.- Estudio de la influencia de las aguas polucionadas sobre la población viviente en el río Huerva. An. Est. Exp. Aula Dei 14(3/4): 607-626 (1979).
- MARGALEF, R.- Los organismos indicadores en la Limnología. Pub. Inst. de Inv. Exp. Biol. aguas continentales (1955).

EXPLICACION DE LAMINAS

Lámina I.- 1) *Mastogloia Smithii* (500 x); 2) *Pediastrum birradiatum* (250 x); 3) *Ulothrix zonata* (500 x); 4) *Pinularia viridis* (250 x).

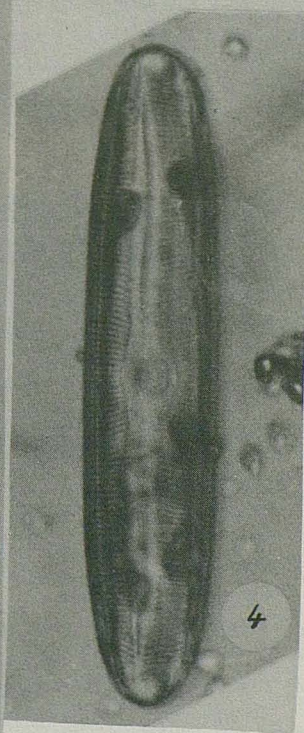
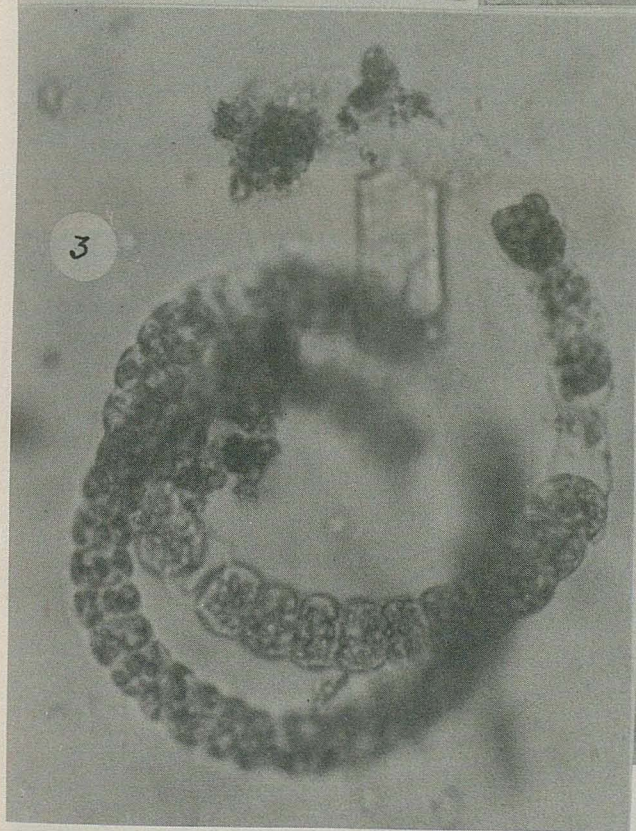
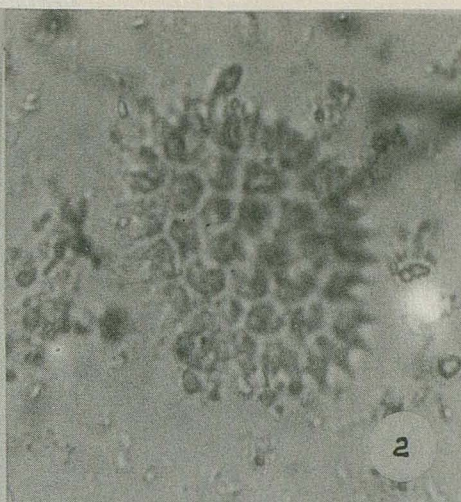
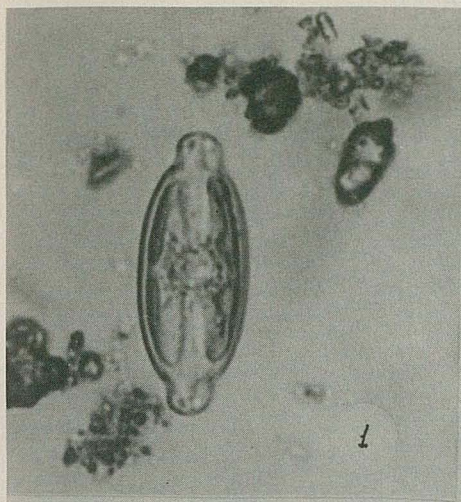
Lámina II.- 1) *Gomphonema olivaceum* (500 x); 2) Detalle a mayor aumento del *Gomphonema olivaceum* (1250 x); 3) *Stigeoclonium protensum* (500 x).

Lámina III.- Distintas especies del género *Spyrogira* encontradas en el curso inferior del río Huerva. 1) *Spyrogira* sp; 2) *Spyrogira tenuisima*; 3) *Spyrogira* sp. Aumento: 250 x.

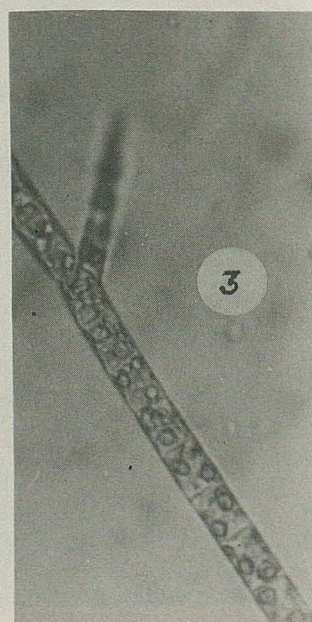
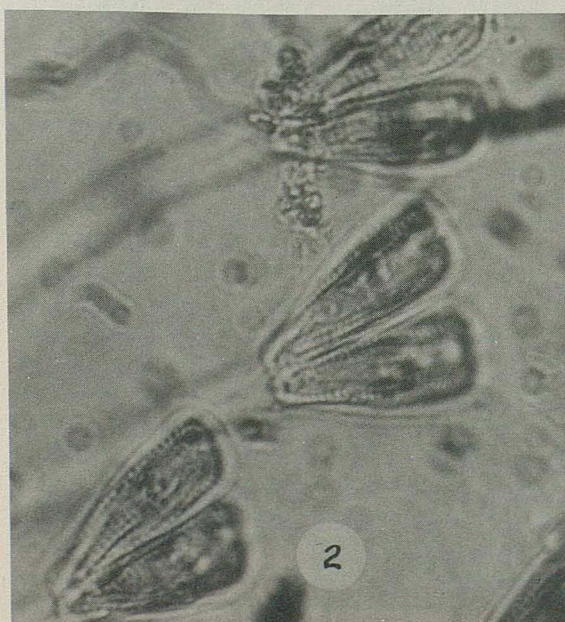
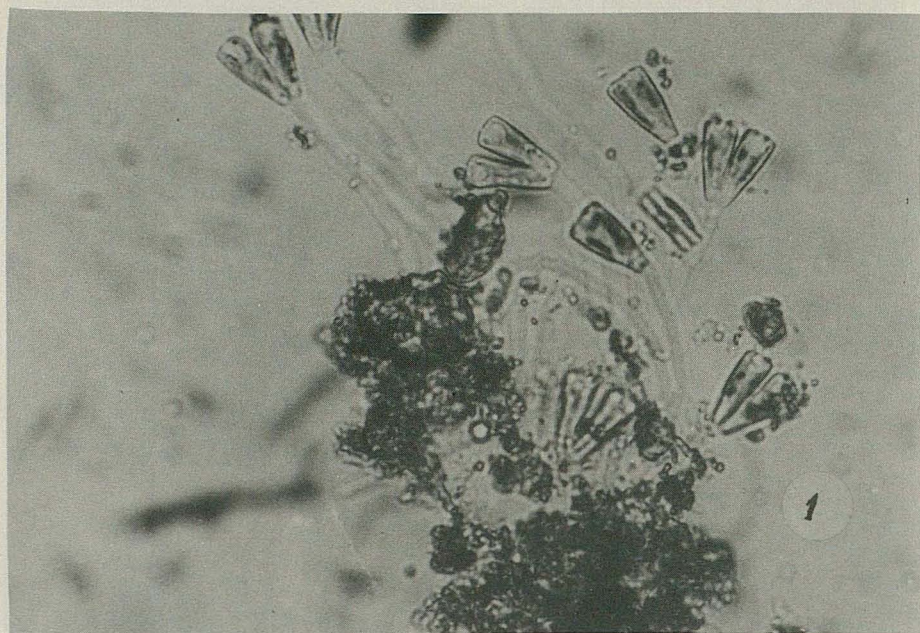
Lámina IV.- 1) *Diatoma elongatum* var. *máxima* (500 x); 2) *Epithemia turgida* (500 x); 3) *Synedra ulna* (500 x); 4) *Amphiprora ornata* (500 x); 5) *Eunotia arcus* (500 x); 6) *Nitschia acicularis* (500 x); 7) *Synedra acus* var. *radians* (250 x).

Lámina V.- 1) *Closterium striolatum* (250 x); 2) *Sphaerosoma* sp (500 x); 3) *Micrasteria denticulata* (500 x); 4) *Cosmarium laeve* (500 x); 5) *Characium gracilis* (500 x); 6) *Oocystis nodulosa* (250 x).

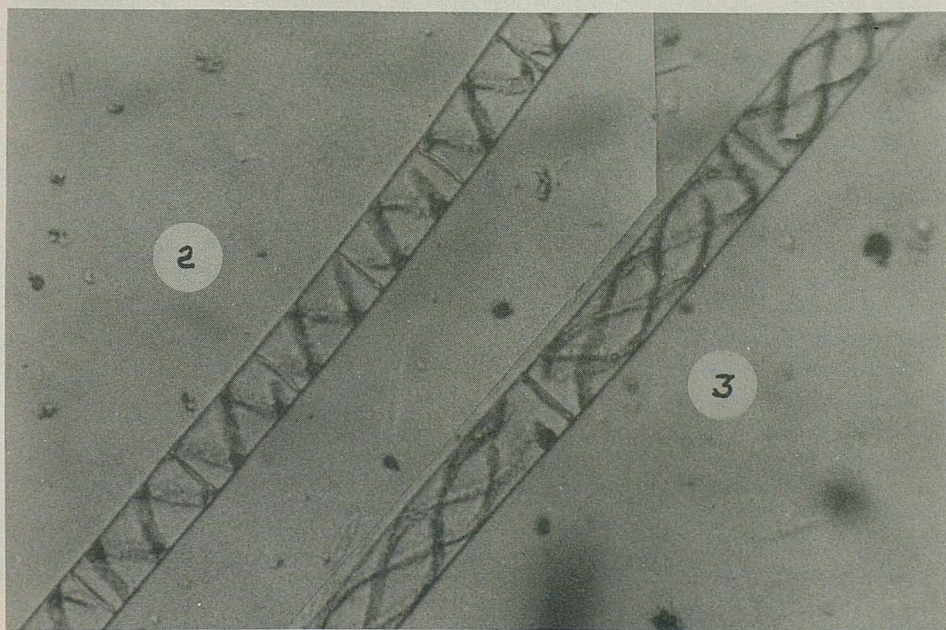
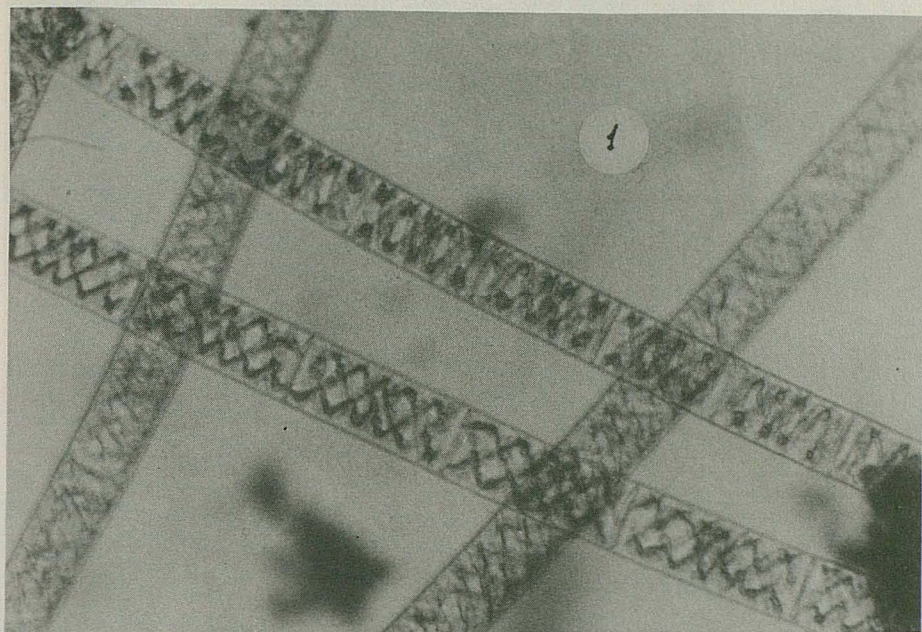
LAMINA I



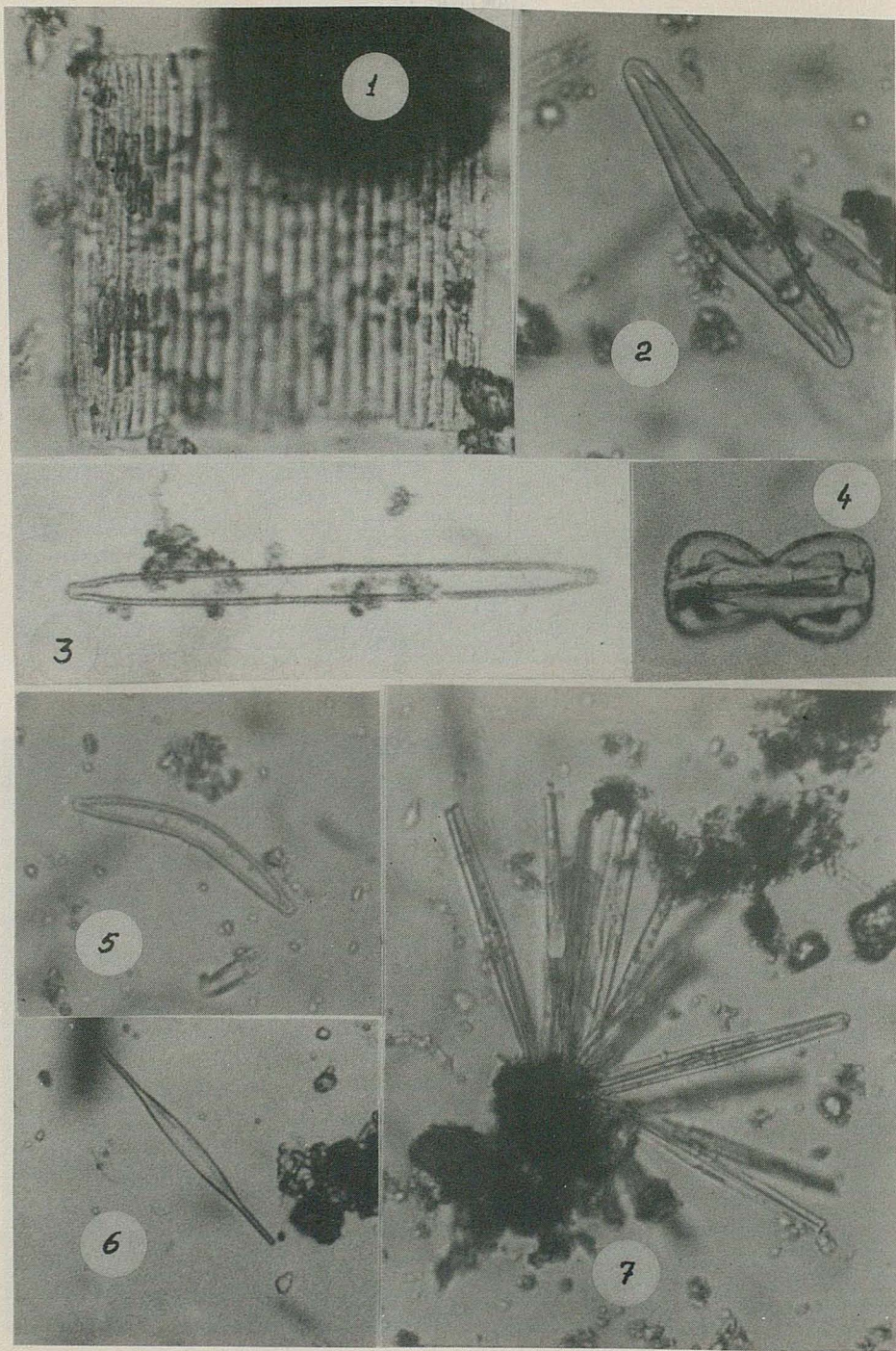
LAMINA II



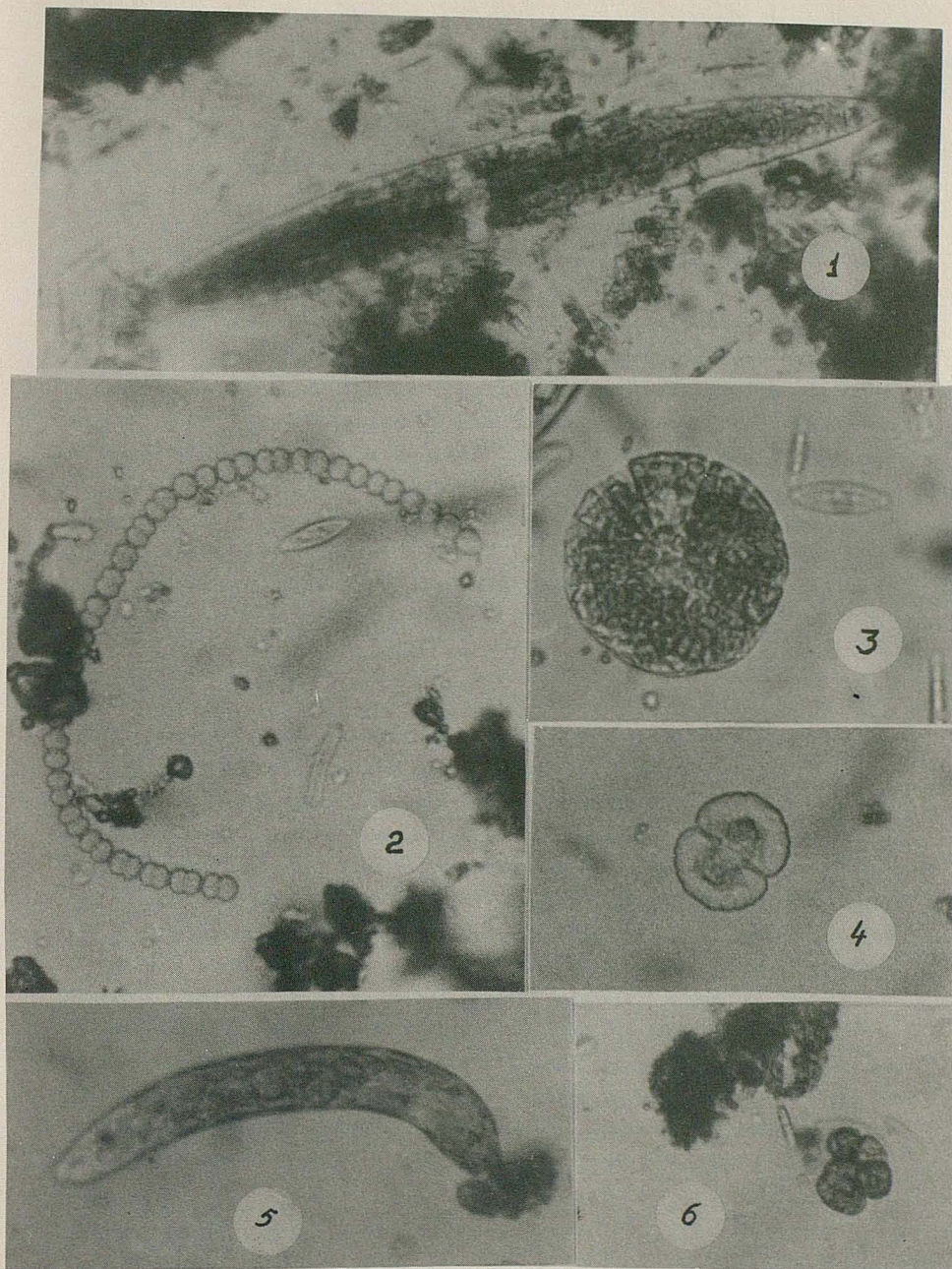
LAMINA III



LAMINA IV



LAMINA V



BREVE INFORME SOBRE EL COLOQUIO

"MATHEMATIQUES À VENIR. QUELS MATHEMATICIENS POUR L'AN 2.000?"

J.L. VIVIENTE

Departamento de Matemáticas. Facultad de Ciencias.
Ciudad Universitaria. 50009 ZARAGOZA (España).

Se da cuenta de los principales temas abordados en el Coloquio, al que asistimos dos españoles, evidenciando alguna de las causas que, de no adoptar medidas adecuadas, hacen preveer una falta de matemáticos en Francia hacia el año 2.000 y la iniciación de un proceso de falta de calidad matemática irreversible. Se citaron alguna de las medidas que, para evitar tal posibilidad, se están experimentando por algunas universidades: Magistère en Mathematiques, Ingenieur Mathematique, etc., aunque se consideraban insuficientes. Resaltó el hecho de que hoy, más que nunca, la formación matemática debe atender el desarrollo de la capacidad de abstracción y análisis junto a su ejercicio sobre problemas concretos de la industria, particularmente la dedicada a alta tecnología.

Introducción.

Los días 9 y 10 de Diciembre de 1987, la S.M.F. y la S.M.F.I. en l'Ecole Polytechnique francesa (Palaiseau, Paris) y bajo el alto patrocinio del Presidente de la Republica, con asistencia del Ministro de Investigación y Enseñanza Superior y el de Transportes y Comunicaciones, bajo la presidencia de Mr. Essambert, nos reunimos más de mil matemáticos, en su mayoría franceses, con los directores de los gabinetes de investigación de industrias tales como M. D'Assault, Thomson, Hoescht, Michelin, Elf-Aquitaine, etc.

El motivo del coloquio fue establecer una reflexión conjunta de los matemáticos y las fuerzas vivas de la sociedad francesa tratando de encontrar algo análogo al "rapport David" en U.S.A. en 1984, es decir, los medios precisos para hacer frente a la constante disminución de matemáticos en Francia y la necesidad, cada vez mayor, que el mundo actual tiene de ellos. No obstante, también se dedicó alguna sesión a la exposición de los grandes problemas matemáticos. El trabajo se desarrolló en sesiones plenarias y mesas redondas.

Sesiones plenarias.

Realizada la apertura del coloquio, las sesiones plenarias se iniciaron con la conferencia del Prof. J.L. Lions, quién después de hacer referencia a

la poca coordinación existente entre la enseñanza de las matemáticas y las necesidades que de ella tiene la industria, citando alguno de los grandes problemas que hoy exigen una profunda actividad matemática, como la modelización, la mecánica de sólidos (robots elásticos, materiales compuestos, etc.), modelización de lo vivo, etc., señaló que debería enriquecerse la enseñanza de las matemáticas con un mayor contacto con la industria, buscando un equilibrio entre la transmisión del conocimiento y un saber hacer.

Le siguió Mr. P. Perrier (de aviones M. Assault) quién, citando algunas de las necesidades en modelización del proyecto Hermes, pasó a señalar el interés que para la industria tienen los nuevos estudios del "Magisterio en Matemáticas" y el de "Ingeniería Matemática", que algunas universidades francesas han implantado en colaboración con la industria local. Estas últimas, además, ofrecen stages a los alumnos al final del 2º y 3º curso. No obstante, espera que tal formación sea lo suficientemente sólida ára permitir, eventualmente, el normal desarrollo de un 2º y 3º ciclo. Por otra parte, añadió, se debe atender, no sólo a la formación inicial, sino a la permanente, exigiendo reciclajes cada cinco años. De modo análogo se expresó Mr. Jablon de Elf-Aquitaine.

Mr. Curien, antiguo Ministro de I. y E.S., profesor de la Universidad de Paris VI, después de referirse a la necesidad de un programa de estimulación (como el de Bélgica en 1983) que oriente a las autoridades sobre las medidas a tomar para evitar la situación que padece la matemática en Francia y poder atender las necesidades de una sociedad cada día más competitiva, señaló que hoy en Francia, y en 1992 en Europa, debe pensarse en que un 80% o un 90% de los jóvenes deberán ser bachilleres. Estudios de bachillerato que deberán capacitar, a la mayoría, para una formación esencialmente tecnológica. Insistió sobre la necesidad de encontrar la adecuada solución en Francia, antes de 1992, pues el problema se agravará a partir de esta fecha. Agravación que, en gran parte, se deberá a las diferencias que en los planes de estudios y titulaciones presentan los distintos países europeos, y ello pese a las reiteradas tentativas para el logro de una "Carta Europea de las Universidades". Sin embargo, entiende que el vínculo puede y debe hacerse ya en la incipiente "Formación Permanente", aprovechando la carencia de tradiciones sobre la misma.

Concluyó insistiendo en la necesidad de disponer de un mayor número de jóvenes con formación matemática relacionada con las necesidades industriales cuidando de que su formación práctica no suponga pérdida de su formación conceptual y de desarrollo de su capacidad de razonamiento matemático. De ahí que consideraba esencial intensificar la relación investigación-docencia, aho-

ra que tanto se habla de la relación investigación-industria.

En respuesta a alguna de las cuestiones anteriores, A. Connes (medalla Fields), en una magistral conferencia, evidenció el importante papel que el Algebra juega en la formación del matemático. Para ello se apoyó en el estudio matemático del "efecto Hall cuántico", de particular interés técnico, realizado por J. Belissard en 1980. Estudió que, a su vez, justifica el operar con la Geometría Diferencial no conmutativa en lugar de la clásica.

Mesas redondas.

En ellas, junto a pequeños grupos de trabajos, se precisaron y discutieron con más detalle las deficiencias evidenciadas en las sesiones plenarios, analizándose las soluciones que, de modo experimental, se estaban tomando por algunas universidades, e incluso las realizadas por algunos profesores.

Se insistió en que la formación matemática del ingeniero debe ser más conceptual y reflexiva ya que, cada vez más, éste debe utilizar un lenguaje más estructurado, exigiéndosele una capacidad de modelización cada vez más fina. Ello es tanto más necesario, cuanto más alta tecnología se precisa desarrollar. La potencia de cálculo y simulación que ha permitido el ordenador, en contrapartida exige del ingeniero una más elevada formación matemática. Para hacer frente a tal situación, hasta ahora la industria ha diversificado sus cuadros contratando a matemáticos, quienes al ser mejor pagados y poder seguir desarrollando su actividad investigadora no han dudado en abandonar la Universidad. Pero, así mismo, están abandonando la Universidad de Francia los más distinguido del profesorado, investigadores y doctorandos menores de 45 años, ante los ventajosos contratos de trabajo (o becas) que ofrece la universidad e industria de Estados Unidos, en una política puesta en marcha con motivo del ya citado rapport David. Esta fuga de cerebros matemáticos (los mejores) está empobreciendo la docencia y la investigación de base en matemáticas. A ello se une, por un lado la falta de atractivo que para el joven bachiller presenta la Licenciatura en Matemáticas (en cierto modo determinado por la deficiente formación matemática que reciben en el bachillerato) y, por otro, la jubilación masiva de un 50% del profesorado universitario actual hacia la primera década de los años 2.000 (en general, los que accedieron a la docencia en los dos o tres años siguientes a Mayo de 1968), hacen temer que, entre los años 2.003 y 2.010, de seguir como hasta ahora, la falta de matemáticos en Francia habrá iniciado un proceso de pérdida de calidad irreversible. Se citó como ejemplo el caso de la matemática alemana que, de ser la primera mundialmente hacia 1933, quedó

diezmada hacia 1944 sin que, pese a los muy importantes créditos que ha disfrutado, haya podido aún recuperar su esplendor.

Por nuestra parte comentamos la orientación diversificadora que se quiere asignar a los planes de estudios de matemáticas en España, en los actuales proyectos de reforma de las enseñanzas universitarias. Si bien precisamos que aun no existía un consenso en cuanto a las "especialidades" y sus contenidos, ni qué asignaturas debían ser troncales y cuales electivas u opcionales. Sin embargo, era claro que más de uno de los problemas y deficiencias expuestas se habían también planteado en la universidad española. Por ejemplo, la falta de atractivo en los jóvenes por los estudios de matemáticas (originada por análogas razones) o la correspondiente jubilación masiva de profesorado (lo que tendrá lugar hacia los años 2.0159.

Resumiendo, podemos resaltar que, de un modo general, la serie de intervenciones pusieron en evidencia que en el momento actual:

- i) La formación de la persona exige, más que nunca, el dominio del bipolo práctica-capacidad de abstracción.
- ii) Que en el dominio de una tal situación, está llamada a jugar un papel esencial la denominada "Formación Permanente", ya que la rápida evolución técnica deja pronto obsoleta toda información inicial.
- iii) Que la formación del ingeniero debe ser diversificada de modo que permita una formación matemática reflexiva-conceptual de alto nivel, como la de la Licenciatura en Matemáticas (y Maitrisse en Francia) al estudiante que se sienta atraído por ella, no sólo por razones vocacionales.
- iv) Que la formación en la Licenciatura de Matemáticas (y Maitrisse en Francia) debe a su vez ser diversificada, pero al mismo tiempo enriquecida con motivaciones concretas y prácticas de las grandes teorías, con el estudio de problemas matemáticos de la ingeniería del software, por ejemplo, y con stages en los departamentos de estudio e investigación en industrias de alta tecnología.
- v) Que el peso de los programas de matemáticas debería gravitar sobre el Algebra, el Análisis Numérico, la Lógica, la Teoría de Grafos y la Teoría de Lenguajes.

En la sesión de clausura del Coloquio, Mr. Essambert indicó que era intención el publicar, próximamente, un libro blanco en el que se recoja toda la problemática, así como la creación de un grupo de reflexión sobre la enseñanza científica a nivel nacional, a la par que se realicen debates entre padres de alumnos y profesores en unos 50 Institutos de Segunda Enseñanza.

NOTA NECROLOGICA

El día 22 de Diciembre de 1988, a la edad de 77 años, falleció en Zaragoza el Ilmo. Sr. D. Angel Sánchez Franco, Académico Numerario de esta Entidad desde el año 1966 y perteneciente a la Sección de Naturales.

Era natural de Salamanca en donde realizó sus estudios de Bachillerato, pasando posteriormente a la Universidad de Madrid, donde obtuvo la Licenciatura de Veterinaria y más tarde el Doctorado con una Tesis que ostentaba el título de "Receptividad del cerdo al bacilo Erysipelothrix rhusiopathie suis y sus aplicaciones biológicas", culminando así una serie de hallazgos relacionados con la patogenia del llamado mal rojo.

En el año 1936 fue Diplomado en Bacteriología por la Escuela Nacional de Sanidad, prestando sus servicios técnicos en el Laboratorio Central del Ejército desde el año 1936 a 1939.

Posteriormente orientó sus conocimientos hacia la empresa privada, llegando a ser Jefe de la Sección de Bacteriología, así como Director Técnico en dos importantes Empresas Industriales dedicadas a la obtención de sueros y vacunas utilizadas en Veterinaria.

En 1949 y 1950 se Diplomó en Parasitología y enfermedades parasitarias por el Instituto de Parasitología de Granada, trabajando posteriormente, como becario, en el Bernhard-Nocht-Institut für Schiffs und Tropenkrankheiten de Hamburgo durante el año de 1957.

En 1963 obtuvo por oposición la Cátedra de Enfermedades Infecciosas y Parasitarias de la Facultad de Veterinaria de la Universidad de Zaragoza, llegando a ocupar los cargos de Secretario y Decano de la misma.

Además de los numerosos trabajos publicados por este ilustre Académico en relación con enfermedades parasitarias de los animales, impartió numerosas conferencias de su especialidad en diversas capitales de España.

Señalemos finalmente que, con independencia de su importante trayectoria científica, era un hombre de carácter amable y abierto al trato con sus discípulos, indicativos de su gran humanidad.

Descanse en paz este ilustre Académico.