

REVISTA  
DE LA  
ACADEMIA  
DE  
CIENCIAS

Exactas  
Físicas  
Químicas y  
Naturales

DE  
ZARAGOZA



Serie 2.<sup>a</sup>  
Volumen 51

1996



# INDICE DE MATERIAS

	<i>Págs.</i>
J. Hernando Pérez. — «Sumas de potencias naturales de números naturales» .....	5
L. Agud, O. R. G. Catalán y J. Garay. — «Dos aplicaciones matemáticas del teorema II de Buckingham» .....	7
I. K. Argyros. — «Error bounds for an almost fourth order method under generalized conditions» .....	19
I. K. Argyros. — «On the convergence of a Chebysheff-Halley-type method using divided differences of order one» .....	27
I. K. Argyros, D. Chen † and Q. Qian‡. — «A Simplified Proof Concerning the Convergence and Error Bound of A Rational Cubic Method in a Banach Space and Applications to Nonlinear Integral Equations» .....	47
M. Ruiz Espejo. — «On asymptotic precision in resampling strategies» .....	57
M. Ruiz Espejo. — «Economic rentibility making use of exhaustive quality control of acceptance» .....	61
M. Ruiz Espejo and L. N. Sahoo. — «On lapelled sampling for finite populations. ....	65
M. Ruiz Espejo. — «On the use of partial auxiliary information» .....	71
M. Ruiz Espejo. — «Estimador de regresión para la varianza de una población finita». ....	73
M. Ruiz Espejo. — «Distribución del número de extracciones con reemplazamiento para obtener una muestra de costo fijo de una población finita .....	77
M. Ruiz Espejo. — «Estimador de regresión para la varianza de una población finita». ....	81
R. Cid y C. Longás. — «Corrección de órbitas de estrellas dobles visuales» .....	85
C. Abad y J. Stock. — «De la observación al movimiento estelar. Aplicación al cálculo del ápex del Cúmulo Abierto en Coma Berenices» .....	93
J. B. Gómez, D. Iñiguez y A. F. Pacheco. — «Stochastic models of fracture of the fiber-bundle type with stress dissipation» .....	121
P. Muñoz-Barragán, J. B. Diez y J. Ferrer. — «Nuevos datos paleobotánicos y paleoecológicos sobre la Formación Escucha en la Cuenca de Castellote (Teruel)» ....	141
C. L. Liesa y L. E. Arlegui. — «Problemas metodológicos en el análisis de lineamientos tectónicos mediante programas de tratamiento digital de imágenes» .....	151
L. F. Auqué, M. J. Gimeno, M. Cornieles, V. Valles, P. L. López y J. Mandado. — «Contenidos y distribución de Tierras Raras en las soluciones asociadas a suelos ácidos tropicales» .....	165
A. Aparicio, J. M. Brell, R. García y M. P. Lapuente. — «El metamorfismo Hercínico de la Faja Pirítica (Provincias de Sevilla y Huelva)» .....	177
L. F. Auqué, J. Mandado, P. L. López y M. J. Gimeno. — «Aplicación del geotermómetro isotópico sulfato-agua $\delta^{18}\text{O SO}_4 = - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$ ) en algunos sistemas termales alcalinos del Pirineo Central» .....	195
P. L. López, L. F. Auqué, J. Mandado, V. Valles y M. J. Gimeno. — «Aplicación de la modelización geoquímica al estudio de sistemas salinos continentales: la laguna La Playa (Zaragoza, España)» .....	209
D. B. de Miralles y L. C. de Villalobos. — «Nueva especie de Neochordodes (Gordiacea Nematomorpha) parásita de Scapteriscus sp. (Grillotalpidae)» .....	237



## Sumas de potencias naturales de números naturales

Jesús Hernando Pérez

I.B.M. Los Castillos

### Abstract

The natural power sums of natural numbers can be directly obtained by means of an expression which involves the wellknown Bernoulli's numbers  $B_k$ . The aim of this article is to give an iterative method by which the sums for a  $r$  exponent can be easily found from the low orders.

### 1. Introduction

Presentamos la suma de series divergentes de potencias naturales de números naturales en términos de sencillas expresiones en forma de sumatorios que serán desarrollados previamente. La elaboración de esta herramientas es elemental y su aplicación al cálculo aparece de forma tan metódica como natural, ilustrando adecuadamente la solidez de estos procedimientos matemáticos.

### 2. Primeras fórmulas y notaciones.

Usamos la siguiente notación:

$$S_n(r) = \sum_{i=1}^n i^r = 1^r + 2^r + \dots + n^r, \forall n, r \in \mathcal{N}$$

con la que obtenemos la expresión:

$$S_n(r+1) - S_n(r) = \sum_{i=1}^n i^r(i-1) = \sum_{i=0}^{n-1} i(i+1)^r \quad (1)$$

### 3. Expresiones para sumas de series divergentes de potencias naturales.

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n S_i(r) &= 1^r + (1^r + 2^r) + \dots + (1^r + 2^r + \dots + n^r) \\ &= n1^r + (n-1)2^r + \dots + [n - (n-1)]n^r \\ &= n(1^r + 2^r + \dots + n^r) - [1 \cdot 2^r + 2 \cdot 3^r + \dots + (n-1)n^r] \\ &= nS_n(r) - \sum_{i=1}^{n-1} i(i+1)^r = (n+1)S_n(r) - S_n(r+1) \end{aligned} \quad (2)$$

donde se ha tenido en cuenta la expresión (1).



#### 4. Otras expresiones para la suma de potencias naturales de orden $r$ .

$$\begin{aligned} S_n(r) &= (1+0)^r + (1+1)^r + \dots + [1+(n-1)]^r \\ &= 1 + \binom{r}{0}1^0 + \dots + \binom{r}{r}1^r + \dots + \binom{r}{0}(n-1)^0 + \dots + \binom{r}{r}(n-1)^r \\ &= n + \binom{r}{1}S_{n-1}(1) + \dots + \binom{r}{r}S_{n-1}(r) \end{aligned} \quad (3)$$

y aplicando reiteradamente esta expresión, tendremos

$$\begin{aligned} S_n(r) &= n + \binom{r}{1}S_{n-1}(1) + \dots + \left[(n-1) + \binom{r}{1}S_{n-2}(1) + \dots + \binom{r}{r}S_{n-2}(r)\right] \\ &= [n + (n-1) + \dots + 1] + \binom{r}{1} \sum_{i=1}^{n-1} S_i(1) + \dots + \binom{r}{r-1} \sum_{i=1}^{n-1} S_i(r-1) \\ &= S_n(1) + \binom{r}{1} \left[ \sum_{i=1}^n S_i(1) - S_n(1) \right] + \dots + \binom{r}{r-1} \left[ \sum_{i=1}^n S_i(r-1) - S_n(r-1) \right] \\ &= S_n(1) + \sum_{k=1}^{r-1} \binom{r}{k} [nS_n(k) - S_n(k+1)] \end{aligned} \quad (4)$$

donde se ha utilizado la expresión (2).

Otra forma para hallar estas sumas, más en consonancia con nuestro objetivo, es la siguiente:

$$S_n(r) = \frac{1}{1+r} \left[ S_n(1) + rnS_n(r-1) + \sum_{k=1}^{r-2} \binom{r}{k} \{nS_n(k) - S_n(k+1)\} \right] \quad (5)$$

obtenida de la expresión anterior y que nos permite calcular cualquiera de estas sumas cuando son conocidas las anteriores.

Como ejemplo, aplicaremos la ecuación anterior en los casos  $n = 2$  y  $n = 3$ .

#### 5. Aplicaciones.

$$\begin{aligned} S_n(0) &= n \\ S_n(1) &= \frac{n(n+1)}{2} \\ S_n(2) &= \frac{1}{3}[S_n(1) + 2nS_n(1)] = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} \\ S_n(3) &= \frac{1}{4} [S_n(1) + 3nS_n(2) + \binom{3}{1} \{nS_n(1) - S_n(2)\}] \\ &= \frac{1}{4} [(3n+1)S_n(1) + (3n-3)S_n(2)] = \frac{n^2(n+1)^2}{4} \end{aligned} \quad (6)$$

#### 6. Bibliografía.

1. Spiegel Murray, R. (1981): *Manual de Fórmulas y Tablas Matemáticas*. McGraw-Hill Latinoamericana S.A. Bogotá.
2. Quinet, J. (1980): *Curso elemental de Matemáticas Superiores*, 3 ed. Paraninfo. Madrid



## **DOS APLICACIONES MATEMATICAS DEL TEOREMA II DE BUCKINGHAM**

*L. Agud , O. R. G. Catalán y J. Garay.*

Departamento de Matemáticas. Área de Análisis Matemático.

Facultad de Ciencias

50009-Universidad de Zaragoza

### **Abstract**

In this paper, a connection between Dimensional and Mathematical Analysis is established and the natural direction of the application of mathematical results to physics is inverted. In this article, two Mathematical classic Analysis theorems are proved taking the celebrated physical II Theorem of Buckingham as origin. These two theorems are the  $n$ -dimensional Theorem of Taylor and the Rule of Barrow for analytic functions. The idea is opened for establishing more loops between both Analysis.

### **§0.- INTRODUCCION**

Habitualmente los físicos suelen utilizar resultados matemáticos para sus aplicaciones. Contrariamente en este trabajo que podemos calificar de un ensayo seguimos el sentido contrario. Utilizaremos un teorema clásico de la física para probar con él dos resultados clásicos del Análisis Matemático. Nos referimos respectivamente al teorema II (físico), al teorema de Taylor y la regla de Barrow (ambos matemáticos).

El teorema II constituye el núcleo del Análisis Dimensional que es una disciplina físico-matemática que estudia todo lo relacionado con el análisis de las dimensiones de las magnitudes físicas. El primer tratado sobre esta materia se debe a Bridgman [1], aunque algunos autores citan como precursor al propio Fourier [2] en su obra clásica



sobre el calor.

Por ejemplo Langhaar [3] dice: "Fourier fue el primero en llamar la atención sobre la naturaleza de las entidades fundamentales y el concepto de dimensiones físicas."

Más recientemente y a nivel de nuestro país, hay que destacar las aportaciones de Julio Palacios [4] y la actividad que desarrolla actualmente el grupo de Análisis Dimensional con sede en la Escuela de Arquitectos de Madrid y encabezado por el profesor González de Posada.

Como antes hemos comentado, el núcleo del Análisis Dimensional lo constituye el Teorema II de Buckingham, así llamado por ser este autor quien al parecer publicó la primera demostración [5]. De todas las maneras, existen varias interesantes anécdotas sobre el origen del teorema que el lector puede encontrar en [6] del grupo anteriormente citado.

Una vez conocido este teorema, ha sido utilizado ampliamente en múltiples aplicaciones técnicas por físicos e ingenieros.

Como dijimos al principio, aquí lo vamos a utilizar para presentar una nueva prueba del Teorema de Taylor y de la Regla de Barrow.

En la sección primera, presentaremos el contenido del Teorema II, con una idea abreviada de su demostración. En las secciones 2 y 3 presentamos las correspondientes demostraciones del Teorema de Taylor y de la regla de Barrow.

## §I.- TEOREMA II

Supongamos que en un problema físico intervienen  $n$  magnitudes físicas ( $A, B, \dots, Z$ ). Sean  $M_1, M_2, \dots, M_k$  las magnitudes físicas fundamentales correspondientes al problema. Supongamos las siguientes relaciones dimensionales entre unas y otras magnitudes:

$$A = M_1^{\alpha_1} M_2^{\alpha_2} \dots M_k^{\alpha_k}$$

$$B = M_1^{\beta_1} M_2^{\beta_2} \dots M_k^{\beta_k}$$

$$Z = M_1^{\zeta_1} M_2^{\zeta_2} \dots M_k^{\zeta_k}$$

Sea  $m_1, m_2, \dots, m_k$  un sistema de unidades de las magnitudes fundamentales. Sean  $\alpha, \beta, \dots, \zeta$  las medidas de  $A, B, \dots, Z$  respecto de estas unidades. Sea finalmente

$$\phi(\alpha, \beta, \dots, \zeta) = 0$$

una fórmula del problema físico objeto de estudio.



Sea  $\{x_1, x_2, \dots, x_k\}$  una  $k$ -tupla de números positivos, y tomemos como nuevas unidades fundamentales las siguientes:

$$\frac{m_1}{x_1}, \frac{m_2}{x_2}, \dots, \frac{m_k}{x_k}$$

Ahora las medidas de  $A, B, \dots, Z$  serán  $\alpha', \beta', \dots, \zeta'$ , que como sabemos se relacionan con las anteriores mediante:

$$\alpha' = \alpha(x_1^{\alpha_1} \dots x_k^{\alpha_k})$$

$$\beta' = \beta(x_1^{\beta_1} \dots x_k^{\beta_k})$$

$$\vdots$$

$$\zeta' = \zeta(x_1^{\zeta_1} \dots x_k^{\zeta_k})$$

Como la fórmula que rige el fenómeno es completa, también se verifica:

$$\phi[\alpha(x_1^{\alpha_1} \dots x_k^{\alpha_k}), \dots, \zeta(x_1^{\zeta_1} \dots x_k^{\zeta_k})] = 0$$

Si ahora fijamos una  $n$ -tupla  $\alpha, \beta, \dots, \zeta$  y dejamos variar las  $x_j$ , obtenemos la siguiente función en  $x_j$  que además será idénticamente nula

$$F(x_1, x_2, \dots, x_k) = \phi[\alpha(x_1^{\alpha_1} \dots x_k^{\alpha_k}), \dots, \zeta(x_1^{\zeta_1} \dots x_k^{\zeta_k})] \equiv 0$$

Ahora derivamos  $F$  respecto de  $x_1$ :

$$\frac{\partial F}{\partial x_1}(x_1, \dots, x_k) = \phi_1 \alpha \alpha_1 x_1^{\alpha_1-1} x_2^{\alpha_2} \dots x_k^{\alpha_k} + \dots + \phi_n \zeta \zeta_1 x_1^{\zeta_1-1} x_2^{\zeta_2} \dots x_k^{\zeta_k} \equiv 0$$

donde con  $\phi_i$  indicamos la  $i$ -ésima derivada parcial de  $\phi$ . Haciendo  $x_1 = x_2 = \dots = x_k = 1$  se obtiene:

$$\alpha \alpha_1 \phi_1 + \beta \beta_1 \phi_2 + \dots + \zeta \zeta_1 \phi_n = 0 \quad (1)$$

Ahora reemplazamos las  $n$  variables  $(\alpha, \beta, \dots, \zeta)$  por  $(\alpha'', \beta'', \dots, \zeta'')$  en la forma siguiente:

a) Si  $\alpha_1 \neq 0$  hacemos  $\alpha = (\alpha'')^{\alpha_1}$

b) Si  $\beta_1 \neq 0$  hacemos  $\beta = \beta''$ .

De esta forma se tiene

$$\begin{aligned} \phi(\alpha, \beta, \dots, \zeta) &= \phi[(\alpha'')^{\alpha_1}, \beta'', \dots, (\zeta'')^{\zeta_1}] = \\ &= G(\alpha'', \beta'', \dots, \zeta'') = 0 \end{aligned}$$



Observemos que la dimensión de estas variables respecto de  $M_1$  es o bien uno (si  $\alpha_1 \neq 0$ ) o bien cero (si  $\beta_1 = 0$ ).

Calculando las derivadas de  $G$ , la relación (1) se convierte en:

$$\alpha'' G_1 + \beta'' G_2 + \dots + \zeta'' G_n = 0 \quad (2)$$

Ahora introducimos unas nuevas variables  $(z_1, z_2, \dots, z_{n-1}, \zeta'')$  en la forma siguiente:

a) Si  $\alpha_1 \neq 0$  hacemos  $\alpha'' = z_1 \zeta''$

b) Si  $\beta_1 = 0$  hacemos  $\beta'' = z_2$

Notemos que todas las variables  $z_j$  son de dimensión nula respecto de  $M_1$ .

Así tenemos:

$$\begin{aligned} G(\alpha'', \beta'', \dots, \zeta'') &= G[z_1 \zeta'', z_2, \dots, z_{n-1} \zeta'', \zeta''] \\ &= H(z_1, z_2, \dots, z_{n-1}, \zeta'') = 0 \end{aligned}$$

Ahora se ve fácilmente que la derivada de  $H$  respecto de la última variable  $\zeta''$  es idénticamente nula, dando así lugar a una nueva función:

$$\Psi_1(z_1, z_2, \dots, z_{n-1}) = 0$$

equivalente a la inicial que describía el problema con una variable menos y además, como ya lo hemos indicado anteriormente, todas ellas adimensionadas respecto de la primera magnitud  $M_1$ .

Como es fácil ver, este proceso se puede reiterar y en cada paso se reduce en una unidad el número de variables y se gana una magnitud respecto de la cual las nuevas variables son adimensionadas.

De esta forma en la etapa final se llega a una función de la forma

$$\Psi(\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{n-k}) = 0 \quad (3)$$

equivalente a la inicial y con todas sus variables totalmente adimensionadas.

Ahora bien, ¿Cómo son las variables  $\Pi_j$ ?. Recordemos que en la primera fase se tenía:

$$z_1 = \frac{\alpha''}{\zeta''} = \alpha^{\frac{1}{\alpha_1}} \zeta^{\frac{-1}{\alpha_1}}$$

Así siguiendo los sucesivos cambios se puede observar que en general la forma de las últimas variables es:

$$\Pi_j = \alpha^{\lambda_1} \beta^{\lambda_2} \dots \zeta^{\lambda_n}$$

donde todos los exponentes  $\lambda_i$  son racionales. Es decir cada nueva variable  $\Pi_j$  es un monomio formado por el producto de potencias de las variables iniciales con exponentes racionales. Esto justifica la notación  $\Pi_j$  y el nombre del teorema, que pasamos ya a enunciar:



**Teorema II.-** Si en un problema físico intervienen  $n$  magnitudes físicas y hay  $k$  magnitudes fundamentales ( $n > k$ ), existe una relación funcional que describe el problema, entre  $n - k$  variables adimensionadas, cada una de las cuales es un producto de potencias con exponente racional de las variables iniciales.

## §II.- TEOREMA DE TAYLOR.

Dada una función  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , consideraremos cada una de las  $n+1$  variables  $(x_1, \dots, x_n, y)$  como medidas de unas magnitudes fundamentales y trataremos de aplicar a  $f$  la técnica del teorema II.

Si indicamos con  $(X_1, \dots, X_n, Y)$  dichas magnitudes fundamentales, resulta que las dimensiones de las  $n+1$  variables  $(x_1, \dots, x_n, y)$  y de las sucesivas derivadas de  $y$ , suponiendo que existan, y denotando con:

$$\frac{\partial^p}{\partial \mathbf{x}^p} = \frac{\partial^{p_1 + \dots + p_n}}{\partial x_1^{p_1} \dots \partial x_n^{p_n}}$$

son las que aparecen en la tabla siguiente :

	$x_1$	...	$x_n$	$y$	$\frac{\partial}{\partial x_1} y$	...	$\frac{\partial}{\partial x_n} y$	...	$\frac{\partial^p}{\partial \mathbf{x}^p} y$	...
$x_1$	1	...	0	0	-1	...	0	...	$-p_1$	...
$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	
$x_n$	0		1	0	0		-1		$-p_n$	
$y$	0		0	1	1		1		1	

★

★

★

Según la técnica del teorema II, hemos de elegir  $n+1$  columnas de manera que la matriz que aparezca sea no singular. En este caso seleccionamos las columnas marcadas. Las columnas restantes las indicamos con la  $n$ -tupla que marca su orden de derivación. En particular  $(0, \dots, 0)$  representa la columna encabezada por  $y$ .

Supondremos sin pérdida de generalidad que todas las derivadas son tomadas en el origen  $(0, \dots, 0)$  y que  $y(0, \dots, 0) = 0$ .

Ahora cada variable  $\Pi_{(p_1, \dots, p_n)}$  está formada por un producto en el que intervienen las  $n+1$  columnas de la matriz fundamental elegida y la propia variable

$$\frac{\partial^p}{\partial \mathbf{x}^p} y$$



con exponentes  $\lambda_i$  que luego determinaremos:

$$\Pi_{(p_1, \dots, p_n)} = x_1^{\lambda_1} \dots x_n^{\lambda_n} \left( \frac{\partial}{\partial x_1} y \right)^{\lambda_{n+1}} \left[ \frac{\partial^p}{\partial x^p} y \right]^{\lambda_{n+2}}$$

La forma para determinar los exponentes, consiste en exigir que la variable sea adimensional, es decir, en igualar a cero los exponentes correspondientes a cada magnitud fundamental.

$$\text{Coeficiente de } X_1: \lambda_1 - \lambda_{n+1} - p_1 \lambda_{n+2} = 0$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$\text{Coeficiente de } X_n: \lambda_n - p_n \lambda_{n+2} = 0$$

$$\text{Coeficiente de } Y: \lambda_{n+1} + \lambda_{n+2} = 0$$

Como el sistema es homogéneo, hacemos  $\lambda_{n+2} = 1$  y de esta forma tenemos la solución:

$$\lambda_1 = p_1 - 1; \dots; \lambda_n = p_n; \lambda_{n+1} = -1; \lambda_{n+2} = 1$$

así la variable adimensional es:

$$\Pi_{(p_1, \dots, p_n)} = \frac{x_1^{p_1} \dots x_n^{p_n}}{x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} y} \frac{\partial^p}{\partial x^p} y$$

De esta forma la función (3) es:

$$\Psi \left[ \frac{y}{x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} y}, \frac{x_2}{x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} y}, \dots, \frac{x_n}{x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} y}, \dots, \frac{x_1^{p_1} \dots x_n^{p_n}}{x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} y} \frac{\partial^p}{\partial x^p} y, \dots \right] = 0$$

y que a su vez origina:

$$\bar{\Psi} \left[ y, x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} y, \dots, x_n \frac{\partial}{\partial x_n} y, \dots, x_1^{p_1} \dots x_n^{p_n} \frac{\partial^p}{\partial x^p} y, \dots \right] = 0$$

Esta igualdad nos permite despejar  $y$  obteniendo una nueva función  $H$  de la siguiente forma:

$$y = H \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} y, \dots, x_n \frac{\partial}{\partial x_n} y, \dots, x_1^{p_1} \dots x_n^{p_n} \frac{\partial^p}{\partial x^p} y, \dots \right) \quad (4)$$

Ahora probemos que  $H$  es una función lineal viendo que sus derivadas parciales son constantes.

Sea  $\alpha = (\alpha_{(p_1, \dots, p_n)}) \in \text{Dom } H$ . Esto supone la existencia de una función analítica  $f$  y un punto  $a = (a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{R}^n$  tales que:



$$\alpha_{(p_1, \dots, p_n)} = a_1^{p_1} \dots a_n^{p_n} \frac{\partial^p}{\partial \mathbf{x}^p} f(0, \dots, 0)$$

y por consiguiente:

$$f(a_1, \dots, a_n) = H(\dots, \alpha_{(p_1, \dots, p_n)}, \dots) \quad (5)$$

Ahora elegimos una n-tupla  $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)$  y definimos para cada  $\mu$  real la función:

$$g_\mu(x_1, \dots, x_n) = f(x_1, \dots, x_n) + \mu x_1^{q_1} \dots x_n^{q_n}$$

Se comprueba fácilmente que:

$$\frac{\partial^p}{\partial \mathbf{x}^p} g_\mu(0, \dots, 0) = \begin{cases} \frac{\partial^p}{\partial \mathbf{x}^p} f(0, \dots, 0) & \text{si } (p_1, \dots, p_n) \neq (q_1, \dots, q_n) \\ \frac{\partial^p}{\partial \mathbf{x}^p} f(0, \dots, 0) + \mu \mathbf{q}! & \text{si } (p_1, \dots, p_n) = (q_1, \dots, q_n) \end{cases}$$

donde  $\mathbf{q}! = q_1! \dots q_n!$ .

De esta manera expresando la función  $g_\mu$  mediante la fórmula (4) tenemos que:

$$g_\mu(x_1, \dots, x_n) = H \left( x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} f, \dots, x_n \frac{\partial}{\partial x_n} f, \dots, x_1^{q_1} \dots x_n^{q_n} \left[ \frac{\partial^{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{x}^{\mathbf{q}}} f + \mu \mathbf{q}! \right], \dots \right)$$

Sustituimos la n-tupla  $(x_1, \dots, x_n)$  por  $(a_1, \dots, a_n)$ , con lo cual la expresión anterior queda:

$$\begin{aligned} g_\mu(a_1, \dots, a_n) &= f(a_1, \dots, a_n) + \mu \mathbf{a}^{\mathbf{q}} \\ &= H \left( a_1 \frac{\partial}{\partial x_1} f, \dots, a_n \frac{\partial}{\partial x_n} f, \dots, a_1^{q_1} \dots a_n^{q_n} \left[ \frac{\partial^{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{x}^{\mathbf{q}}} f + \mu \mathbf{q}! \right], \dots \right) \\ &= H(\alpha_{(1,0,\dots,0)}, \dots, \alpha_{(0,\dots,1)}, \dots, \alpha_{(q_1,\dots,q_n)} + \mathbf{a}^{\mathbf{q}} \mu \mathbf{q}! \dots) \end{aligned}$$

Para abreviar tomaremos  $\delta = \mathbf{a}^{\mathbf{q}} \mu \mathbf{q}!$  y calculando el cociente incremental de  $H$  correspondiente a la variable de lugar  $(q_1, \dots, q_n)$ , teniendo en cuenta para ello la fórmula (5) tenemos:

$$\frac{H(\dots, \alpha_{(q_1,\dots,q_n)} + \delta, \dots) - H(\dots, \alpha_{(q_1,\dots,q_n)}, \dots)}{\delta} = \frac{1}{\mathbf{q}!}$$

y en consecuencia existe la derivada parcial de  $H$  respecto de la variable de lugar  $(q_1, \dots, q_n)$  y además dicha derivada es constantemente igual a  $\frac{1}{\mathbf{q}!}$ .

En consecuencia,  $H$  es lineal y de la forma:



$$y = \sum_{(p_1, \dots, p_n)} \frac{x^p}{p!} \frac{\partial^p}{\partial x^p} y(0, \dots, 0)$$

y éste es precisamente el desarrollo del Teorema de Taylor.

### §III.- REGLA DE BARROW

Ahora supongamos  $f(t)$  una función real con dominio algún intervalo que contenga al 0. Para cada  $x$  dentro del dominio tratamos de valorar la integral de  $f$  sobre  $[0, x]$  interpretada como el área encerrada entre  $f$ , el eje OX y las ordenadas en 0 y en  $x$ .

Dicha integral la indicaremos con  $I(f, x)$ , y supondremos como consecuencia de su significado geométrico que  $I$  es lineal y monótona respecto de  $f$ .

Como el Teorema II sólo admite un conjunto contable de datos, hemos de limitarnos a suponer que  $f$  es analítica y así queda determinada por sus derivadas sucesivas en un punto, que en nuestro caso elegiremos el origen. También suponemos que la función no es idénticamente nula y que por consiguiente existe  $k \in \mathbb{N}$  tal que  $f^{(k)}(0) \neq 0$ . Aquí supondremos que  $k = 0$  y por lo tanto  $f(0) \neq 0$ .

Exponemos a continuación la tabla de dimensiones de las diversas variables, en función de las dos magnitudes fundamentales que indicaremos con  $X$  e  $Y$ .

	$x$	$I(f, x)$	$f(0)$	$f'(0)$	...	$f^{(n)}(0)$	...
$x$	1	1	0	-1		-n	
$y$	0	1	1	1		1	

★

★

Eligiendo las dos columnas marcadas para formar la matriz no singular y procediendo en forma análoga a lo hecho en la sección II, encontramos las siguientes variables adimensionadas:

$$\Pi_I = \frac{I}{x f(0)}$$

$$\Pi_1 = \frac{x f'(0)}{f(0)} = \frac{x^2 f'(0)}{x f(0)}$$

En general:

$$\Pi_n = \frac{x^n f^{(n)}(0)}{f(0)} = \frac{x^{n+1} f^{(n)}(0)}{x f(0)}$$

Según el teorema II existe una función  $\Phi$  tal que:



$$\Phi[\Pi_I, \Pi_1, \dots, \Pi_n, \dots] = 0$$

y por consiguiente:

$$\Pi_I = \frac{I}{xf(0)} = F[\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_n, \dots]$$

de donde:

$$I = xf(0)F\left[\frac{x^2 f'(0)}{xf(0)}, \frac{x^3 f''(0)}{xf(0)}, \dots, \frac{x^{n+1} f^{(n)}(0)}{xf(0)}, \dots\right]$$

y finalmente:

$$I = G[xf(0), x^2 f'(0), x^3 f''(0), \dots, x^{n+1} f^{(n)}(0), \dots]$$

Hasta aquí llega el Análisis Dimensional. Ahora bien, ¿cómo es la función  $G$ ? Analizando sus derivadas parciales veremos que es lineal respecto de cada una de sus variables.

Elegimos cualquier punto  $(\alpha_n)$  del dominio de  $G$ . Esto supone que existen  $f$ , función analítica y un número positivo  $a$  tales que:

$$\alpha_n = a^{n+1} f^{(n)}(0) \quad \forall n$$

Para cada  $\delta \neq 0$  definimos:

$$g_\delta(t) = af(at) + \delta t^n$$

Se ve que entonces:

$$g_\delta^{(k)}(0) = \begin{cases} \alpha_k & \text{si } k \neq n \\ \alpha_n + \delta n! & \text{si } k = n \end{cases}$$

Ahora tenemos:

$$I[af(at), 1] = G(\alpha_0, \dots, \alpha_{n-1}, \alpha_n, \alpha_{n+1}, \dots)$$

$$I[g_\delta, 1] = G(\alpha_0, \dots, \alpha_{n-1}, \alpha_n + \delta n!, \alpha_{n+1}, \dots)$$

Así podemos calcular el cociente incremental de  $G$  respecto a la  $n$ -ésima variable:

$$\frac{\Delta_n G}{\delta n!} = \frac{I[g_\delta, 1] - I[af(at), 1]}{\delta n!} = \frac{I[t^n, 1]}{n!} \quad (6)$$

donde hemos tenido en cuenta la definición de  $g_\delta$  y la propiedad de linealidad supuesta al principio para  $I$ .

Vemos por (6) que existe derivada  $n$ -ésima de  $G$  y que dicha derivada es constante.

Vamos ahora a calcular dicha derivada  $G_n$ . Si  $p(t) = t^n$  tenemos:



$$L(x) = I(p, x) = G(0, \dots, 0, x^{n+1}n!, 0, \dots)$$

Derivamos respecto de  $x$ :

$$\frac{dL}{dx}(x) = G_n(n+1) x^n n! = G_n(n+1)! x^n$$

En particular, si  $x = 1$ , tenemos:

$$\frac{dL}{dx}(1) = G_n(n+1)! \quad (7)$$

Por otra parte:

$$L(1+\epsilon) - L(1) = I[p, 1+\epsilon] - I[p, 1]$$

y utilizando las hipótesis iniciales se tiene:

$$\epsilon \leq I[p, 1+\epsilon] - I[p, 1] \leq \epsilon (1+\epsilon)^n$$

por lo que resulta

$$\frac{dL}{dx}(1) = 1$$

que reemplazándolo en (7) nos da el valor de:

$$G_n = \frac{1}{(n+1)!}$$

De esta manera tenemos ya el valor de  $I(f, x)$ :

$$\int_0^x f(t) dt = I(f, x) = \sum_{n=0}^{+\infty} G_n x^{n+1} f^{(n)}(0) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{(n+1)!} x^{n+1}$$

Si a esta nueva función la llamamos  $F$  se observa que  $F' = f$ , es decir que  $F$  es una primitiva de  $f$ .

Así hemos llegado a la conocida regla de Barrow para nuestro caso:

$$\int_0^x f(t) dt = F(x) - F(0)$$

## BIBLIOGRAFIA:

[1].- BRIDGMAN, P.W.

*Dimensional Analysis.*

(1922).



- [2].- FOURIER, J.  
*Theorie Analytique de la Chaleur.*  
París. (1822).
- [3].- LANGHAAR, H.L.  
*Dimensional Analysis and Theory of Models.*  
New York. (1956).
- [4].- PALACIOS, J.  
*Análisis Dimensional.*  
Madrid. (1956).
- [5].- BUCKINGHAM, E.  
*On Physically Similar Systems: Illustrations of the Use of Dimensional Equations.*  
Physical Review. Vol. 4. (1914) pp. 345-350.
- [6].- GONZALEZ REDONDO, F.A.  
*En torno al Teorema II. El objetivo historiable y la necesidad de servicios históricos.*  
Madrid: G.T.A.D.- E.T.S. Arquitectura. (1995).



# ERROR BOUNDS FOR AN ALMOST FOURTH ORDER METHOD UNDER GENERALIZED CONDITIONS

Ioannis K. Argyros

Cameron University  
Department of Mathematics  
Lawton, OK 73505, U.S.A.

**Abstract.** We provide a convergence theorem for an almost fourth order method in a Banach space. The same method was found to be convergent of order four under standard Newton-Kantorovich-type assumptions [3]. In this study we show how to improve on these ever further by introducing some Ptak-like conditions.

## I. INTRODUCTION

In this study we are concerned with the problem of approximating a locally unique solution  $x^*$  of the nonlinear equation

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

in a Banach space  $E_1$ , where  $F$  is a nonlinear operator defined on some convex subset  $D$  of  $E_1$  with values in a Banach space  $E_2$ .

We recently introduced the method given by

$$y_n = x_n - F'(x_n)^{-1}F(x_n) \quad (2)$$

$$H(x_n, y_n) = F'(x_n)^{-1} \left( F' \left( x_n + \frac{2}{3}(y_n - x_n) \right) - F'(x_n) \right) \quad (3)$$

$$x_{n+1} = y_n - \frac{3}{4}H(x_n, y_n) \left( I - \frac{3}{2}H(x_n, y_n) \right) (y_n - x_n) \quad (4)$$

for all  $n \geq 0$  and for some  $x_0 \in D$ . Here  $F'(x_n)$  denotes a linear operator which is the Fréchet-derivative of the operator  $F$  evaluated at  $x = x_n$ . We showed that under standard Newton-Kantorovich hypotheses the order of convergence of the iteration  $\{x_n\}$  ( $n \geq 0$ ) to a locally unique solution  $x^*$  of equation (1) is four [3], [4], using Lipschitz hypotheses on the second Fréchet-derivative of  $F$ .

In this study we improve further on these results by assuming that the following conditions are satisfied

$$\|F'(x+h) - F'(x)\| \leq A(t + \|h\|, t) \quad (5)$$

for all  $x \in U(x_0, R) = \{x \in E_1 \mid \|x - x_0\| \leq R\} \subseteq D$  for some fixed  $x_0 \in D$  and sufficiently small and fixed  $R > 0$  with  $\|h\| \leq R - t$ . The function  $A$  is continuous in both variables and such that if one of the variables is fixed then  $A$  is an increasing function of the other on  $[0, R]$ .

We first introduced these conditions in [1]-[3] and the references there, for Newton and Newton-like methods to improve on the error bounds related with Ptak or Zabrejko-Nguen assumptions [5], [7] and the references there. We also show how to choose the function  $A$ .



## II. CONVERGENCE ANALYSIS

We will need to introduce the constants

$$t_0 = 0, s_0 \geq \|y_0 - x_0\|, \beta \geq \|F'(x_0)^{-1}\| \quad \text{for some } x_0 \in D \quad (6)$$

$$a = 1 - \beta A(R_1, 0) \quad (7)$$

$$a_0 = 1 - \beta A(R_1, 0) \quad \text{if } R = R_1 \quad \text{or} \quad (8)$$

$$a_0 = 1 - \frac{\beta}{R - R_1} \int_{R_1}^R A(t, 0) dt \quad (9)$$

for fixed  $R_1$  and  $R$  with  $0 \leq R_1 < R$ , the sequences

$$\bar{a}_n = 1 - \beta A(\|x_n - x_0\|, 0) \quad (10)$$

$$a_n = 1 - \beta A(t_n, 0) \quad (11)$$

$$\bar{b}_n = A\left(\|x_n - x_0\| + \frac{2}{3}\|y_n - x_n\|, \|x_n - x_0\|\right) \quad (12)$$

$$b_n = A\left(\frac{t_n + 2s_n}{3}, t_n\right) \quad (13)$$

$$s_{n+1} = t_{n+1} + \frac{\beta h_{n+1}}{a_{n+1}} \quad (14)$$

$$t_{n+1} = s_n + \frac{c_n}{a_n}, \quad (15)$$

$$h_{n+1} = \int_{s_n}^{t_{n+1}} A(t, s_n) dt + \int_{t_n}^{s_n} A(t, t_n) dt + c_n + d_n, \quad (16)$$

$$c_n = \frac{3}{4} \frac{\beta A\left(\frac{t_n + 2s_n}{3}, t_n\right)}{a_n} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{\beta A\left(\frac{t_n + 2s_n}{3}, 0\right)}{a_n}\right) (s_n - t_n), \quad (17)$$

$$d_n = \frac{\beta A\left(\frac{t_n + 2s_n}{3}, t_n\right)}{a_n} A(t_n, s_n) (s_n - t_n), \quad (18)$$

$$e_{n+1} = \beta \left[1 - \beta \int_0^1 A((1-t)\|x^* - x_0\| + t\|x_{n+1} - x_0\|, 0) dt\right]^{-1}, \quad (19)$$

$$p_n = \int_0^1 A(\|x_n - x_0\| + t\|x^* - x_n\|, \|x_n - x_0\|) \|x^* - x_n\| dt \quad \text{for all } n \geq 0 \quad (20)$$

and the functions

$$T(r) = s_0 + \int_{s_0}^r A(t, r) dt + \int_0^r A(t, r) dt + f(r)r, \quad (21)$$

$$\begin{aligned} f(r) = & \frac{3}{4} A(r, r) \left(1 + \frac{\beta A(r, r)}{a(r)}\right) + \frac{1}{2} \frac{\beta A(r, r)}{a(r)} A(r, r) \\ & + \frac{3}{4} \frac{\beta A(r, r)}{a(r)} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{\beta A(r, r)}{a(r)}\right) \end{aligned} \quad (22)$$

and

$$a(r) = 1 - \beta A(r, 0) \quad \text{on } [0, R]. \quad (23)$$

We can now state and prove the main result:

**Theorem 1.** Let  $F: D \subseteq E_1 \rightarrow E_2$  be a nonlinear operator whose Fréchet derivative  $F'$  satisfies condition (5) on  $U(x_0, R)$  for some fixed  $x_0 \in D$  and  $R > 0$ .



Assume:

(i) There exists a minimum nonnegative number  $R_1$  such that

$$T(R_1) \leq R_1. \quad (24)$$

(ii) The numbers  $R, R_1$  with  $0 \leq R_1 \leq R$  are such that the constants  $a$  and  $a_0$  given by (7) and (8) respectively are positive and  $U(x_0, R) \subseteq D$ .

Then

(a) the scalar sequence  $\{t_n\}$  ( $n \geq 0$ ) generated by (14) and (15) is monotonically increasing and bounded above by its limit, which is number  $R_1$ ;

(b) the sequence  $\{x_n\}$  ( $n \geq 0$ ) generated by (2)-(4) is well defined, remains in  $U(x_0, R_1)$  for all  $n \geq 0$ , and converges to a solution  $x^*$  of the equation  $F(x) = 0$ , which is unique in  $U(x_0, R)$ .

Moreover, the following estimates are true for all  $n \geq 0$

$$\|y_n - x_n\| \leq s_n - t_n, \quad (25)$$

$$\|x_{n+1} - y_n\| \leq t_{n+1} - s_n, \quad (26)$$

$$\|x^* - x_n\| \leq R_1 - t_n, \quad (27)$$

$$\|x^* - s_n\| \leq R_1 - s_n, \quad (28)$$

$$\|F(x_{n+1})\| \leq \bar{h}_{n+1} \leq h_{n+1} \quad (29)$$

$$\|x^* - x_{n+1}\| \leq e_{n+1} \bar{h}_{n+1} \leq R_1 - t_{n+1} \quad (30)$$

and

$$\|y_n - x_n\| \leq \|x^* - x_n\| + \frac{\beta}{a_n} p_n, \quad (31)$$

where  $\bar{h}_{n+1}$  is given by

$$\begin{aligned} \bar{h}_{n+1} = & \int_0^1 A(\|y_n - x_0\| + t\|x_{n+1} - y_n\|, \|y_n - x_0\|) \|x_{n+1} - y_n\| dt \\ & + \int_0^1 A(\|x_n - x_0\| + t\|y_n - x_n\|, \|x_n - x_0\|) \|y_n - x_n\| dt \\ & + \frac{3}{4} A\left(\|x_n - x_0\| + \frac{2}{3}\|y_n - x_n\|, \|x_n - x_0\|\right) \|y_n - x_n\| \\ & + \frac{1}{2} \beta \frac{\bar{b}_n}{a_n} A(\|x_n - x_0\| + \|y_n - x_n\|, \|x_n - x_0\|) \|y_n - x_n\| \\ & + \frac{3}{4} A\left(\|x_n - x_0\| + \frac{2}{3}\|y_n - x_n\|, \|x_n - x_0\|\right) \beta \frac{\bar{b}_n}{a_n} \|y_n - x_n\|. \end{aligned}$$

**Proof.** (a) By relations (6), (14), (15), and the monotonicity of the function  $A$ , we deduce that the sequence  $\{t_n\}$  ( $n \geq 0$ ) is monotonically increasing and nonnegative. By the same relations we can easily get  $t_0 \leq s_0 \leq t_1 \leq s_1 \leq R_1$ . Let us assume that  $t_k \leq s_k \leq t_{k+1} \leq s_{k+1} \leq R_1$  for  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ . Then by relations (14) and (15) we can have in turn

$$\begin{aligned} t_{k+2} \leq t_{k+1} + \frac{\beta}{a(R_1)} \left\{ \int_{s_k}^{t_{k+1}} A(t, s_k) dt + \int_{t_k}^{s_k} A(t, t_k) dt \right. \\ \left. + \frac{3}{4} A\left(\frac{(k+2s_k)}{3}, t_k\right) \left(1 + \frac{\beta A\left(\frac{t_k+2s_k}{3}, t_k\right)}{a_k}\right) (s_k - t_k) + \frac{1}{2} \frac{\beta A\left(\frac{t_k+2s_k}{3}, t_k\right)}{a_k} A(t_k, s_k) (s_k - t_k) \right. \\ \left. + \frac{3}{4} \frac{\beta A(t_k, s_k)}{a_k} (s_k - t_k) \right\} + \frac{3}{4} \frac{\beta A\left(\frac{t_k+2s_k}{3}, t_k\right)}{a_k} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{\beta A\left(\frac{t_k+2s_k}{3}, t_k\right)}{a_k}\right) (s_k - t_k) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&\leq \cdots \leq s_0 + \frac{\beta}{a(R_1)} \left[ \int_{s_0}^{t_{k+1}} A(t, R_1) dt + \int_0^{s_k} A(t, R_1) dt + \frac{3}{4} A(R_1, R_1) \left( 1 + \frac{\beta A(R_1, R_1)}{a(R_1)} \right) R_1 \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{\beta A(R_1, R_1)}{a(R_1)} A(R_1, R_1) R_1 + \frac{3}{4} A(R_1, R_1) \left( 1 + \frac{3}{2} \frac{\beta A(R_1, R_1)}{a(R_1)} \right) R_1 \right] \\
&= T(R_1) \leq R_1 \quad \text{by (24).}
\end{aligned}$$

Hence, the scalar sequence  $\{t_n\}$  ( $n \geq 0$ ) is bounded above by  $R_1$ . By hypotheses (24)  $R_1$  is the minimum positive zero of the equation  $T(r) - r = 0$  in  $[0, R_1]$  and from the above  $R_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} t_n$ .

(b) Using (6), (7), (14) and (15) we get  $x_1, y_0 \in U(x_0, R_1)$ , and that estimates (25) and (26) are true for  $n = 0$ . Let us assume that they are true for  $k = 0, 1, 2, \dots, n-1$ . In fact by the induction hypothesis

$$\begin{aligned}
\|x_{k+1} - x_0\| &\leq \|x_{k+1} - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \leq \|x_{k+1} - y_k\| + \|y_k - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \\
&\leq \cdots \leq (t_{k+1} - s_k) + (s_k - s_0) + s_0 \leq t_{k+1} \leq R_1,
\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
\|y_{k+1} - x_0\| &\leq \|y_{k+1} - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \leq \|y_{k+1} - x_{k+1}\| + \|x_{k+1} - y_k\| \\
&\quad + \|y_k - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \\
&\leq \cdots \leq (s_{k+1} - t_{k+1}) + (t_{k+1} - s_k) + (s_k - s_0) + s_0 \leq s_{k+1} \leq R_1.
\end{aligned}$$

That is  $x_n, y_n \in U(x_0, R_1)$  for all  $n \geq 0$ . Using hypothesis (5) we can have

$$\begin{aligned}
\|F'(x_0)^{-1}\| \cdot \|F'(x_k) - F'(x_0)\| &\leq \beta A(\|x_k - x_0\|, 0) \leq \beta A(t_k, 0) \\
&\leq \beta A(R_1, 0) < 1.
\end{aligned}$$

It now follows from the Banach lemma on invertible operators [4] that  $F'(x_k)$  is invertible, and

$$\|F'(x_n)^{-1}\| \leq \frac{\beta}{a_n} \leq \frac{\beta}{a_n}. \quad (32)$$

By (2)-(4) we can easily obtain the approximation

$$\begin{aligned}
F(x_{n+1}) &= \int_0^1 [F'(y_n + t(x_{n+1} - y_n)) - F'(y_n)](x_{n+1} - y_n) dt \\
&\quad + \int_0^1 [F'(x_n + t(y_n - x_n)) - F'(x_n)](y_n - x_n) dt \\
&\quad - \frac{3}{4} \left( F' \left( \frac{x_n + 2y_n}{3} \right) - F'(x_n) \right) (y_n - x_n) \\
&\quad - \frac{1}{2} \left\{ (F'(y_n) - F'(x_n)) - \frac{3}{2} \left( F' \left( \frac{x_n + 2y_n}{3} \right) - F'(x_n) \right) \right\} H(x_n, y_n)(y_n - x_n) \quad (33)
\end{aligned}$$

for all  $n \geq 0$ .

Using condition (5), the induction hypothesis and (32) we can have in turn

$$\begin{aligned}
\|F(x_{n+1})\| &\leq \int_0^1 A(\|y_n - x_0\| + t\|x_{n+1} - y_n\|, \|y_n - x_0\|) \|x_{n+1} - y_n\| dt \\
&\quad + \int_0^1 A(\|x_n - x_0\| + t\|y_n - x_n\|, \|x_n - x_0\|) \|y_n - x_n\| dt \\
&\quad + \frac{3}{4} A \left( \|x_n - x_0\| + \frac{2}{3} \|y_n - x_n\|, \|x_n - x_0\| \right) \|y_n - x_n\| \\
&\quad + \frac{1}{2} \beta \frac{\bar{b}_n}{a_n} A(\|x_n - x_0\| + \|y_n - x_n\|, \|x_n - x_0\|) \|y_n - x_n\| \\
&\quad + \frac{3}{4} A \left( \|x_n - x_0\| + \frac{2}{3} \|y_n - x_n\|, \|x_n - x_0\| \right) \beta \frac{\bar{b}_n}{a_n} \|y_n - x_n\| = \bar{h}_{n+1} \quad (34)
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&\leq \int_0^1 A(s_n + t(t_{n+1} - s_n), s_n)(t_{n+1} - s_n)dt + \int_0^1 A(t_n + t(s_n - t_n), t_n)(s_n - t_n)dt \\
&\quad + \frac{3}{4}A\left(t_n + \frac{2}{3}(s_n - t_n), t_n\right)(s_n - t_n) + \frac{\beta}{2} \frac{A\left(\frac{t_n + 2s_n}{3}, t_n\right)}{a_n} A(s_n, t_n)(s_n - t_n) \\
&\quad + \frac{3}{4}A\left(t_n + \frac{2}{3}(s_n - t_n), t_n\right) \frac{\beta A\left(\frac{t_n + 2s_n}{3}, t_n\right)}{a_n} (s_n - t_n) = h_{n+1}, \text{ by (16)}. \quad (35)
\end{aligned}$$

By relations (2) and (35)

$$\|y_{n+1} - x_{n+1}\| \leq \|F'(x_{n+1})^{-1}\| \cdot \|F(x_{n+1})\| \leq \frac{\beta \bar{h}_{n+1}}{\bar{a}_{n+1}} \leq \frac{\beta h_{n+1}}{a_{n+1}} = s_{n+1} - t_{n+1}$$

by (14), which shows (25) for all  $n \geq 0$ .

Similarly from (3), (4) and the above

$$\begin{aligned}
\|x_{n+1} - y_n\| &\leq \frac{3}{4} \frac{\bar{b}_n}{\bar{a}_n} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{\bar{b}_n}{\bar{a}_n}\right) \|y_n - x_n\| \\
&\leq \frac{3}{4} \frac{\beta A\left(\frac{t_n + 2s_n}{3}, t_n\right)}{a_n} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{\beta A\left(\frac{t_n + 2s_n}{3}, t_n\right)}{a_n}\right) \\
&\quad \cdot (s_n - t_n) = t_{n+1} - s_n,
\end{aligned}$$

which shows (26) for all  $n \geq 0$ .

It now follows from estimates (25) and (26) that the sequence  $\{x_n\}$  ( $n \geq 0$ ) is Cauchy in a Banach space  $E_1$  and as such it converges to some  $x^* \in U(x_0, R_1)$  with  $F(x^*) = 0$  (by (2)).

To show uniqueness, we assume that there exists another solution  $y^*$  of equation (1) in  $U(x_0, R)$ . Then from hypothesis (5), we get

$$\begin{aligned}
&\|F'(x_0)^{-1}\| \cdot \int_0^1 \|F'(x^* + t(y^* - x^*)) - F'(x_0)\| dt \\
&\leq \beta \int_0^1 A(\|x^* + t(y^* - x^*) - x_0\|, 0) dt \\
&\leq \beta \int_0^1 A((1-t)\|x^* - x_0\| + t\|y^* - x_0\|, 0) dt \\
&\leq \beta \int_0^1 A((1-t)R_1 + tR, 0) dt < 1, \quad \text{since } a_0 > 0 \text{ by (i)}.
\end{aligned}$$

It now follows that the linear operator  $\int_0^1 F'(x^* + t(y^* - x^*)) dt$  is invertible, and from the approximation

$$F(y^*) - F(x^*) = \int_0^1 F'(x^* + t(y^* - x^*)) dt (y^* - x^*)$$

it follows that  $x^* = y^*$ .

Estimates (27) and (28) follow easily from estimates (25) and (26).

Finally, using the triangle inequality, and the approximations

$$\begin{aligned}
x_{n+1} - x^* &= B_{n+1}^{-1} F(x_{n+1}) \\
B_{n+1} &= \int_0^1 F'(x^* + t(x_{n+1} - x^*)) dt, \\
y_n - x_n &= x^* - x_n + F'(x_n)^{-1} \left\{ \int_0^1 (F'(x_n + t(x^* - x_n)) - F'(x_n))(x^* - x_n) dt \right\}
\end{aligned}$$

and the estimates



$$\begin{aligned}
& \|F'(x_0)^{-1}\| \cdot \int_0^1 \|F'(x^* + t(x_{n+1} - x^*)) - F'(x_0)\| dt \\
& \leq \beta \int_0^1 A(\|x^* + t(x_{n+1} - x^*) - x_0\|, 0) dt \\
& \leq \beta \int_0^1 A((1-t)\|x^* - x_0\| + t\|x_{n+1} - x_0\|, 0) dt \\
& \leq \beta \int_0^1 A((1-t)R_1 + tR_1, 0) dt \leq \beta A(R_1, 0) < 1 \text{ by } a > 0,
\end{aligned}$$

and

$$\|B_{n+1}^{-1}\| \leq e_{n+1},$$

where  $e_{n+1}$  is given by (19), we can immediately obtain estimates (30) and (31).

That completes the proof of the theorem.

**Remarks.** (a) The function  $A$  appearing at the right hand side of condition (5) can be chosen as

$$A(t + \|h\|, t) = \sup_{x \in U(x_0, t), \|h\| \leq R-t} \|F'(x+h) - F'(x)\|.$$

Condition (5) will then follow from the above choice of the function  $A$ .

(b) Let us assume that instead of condition (5) the following is true

$$\|F'(v) - F'(w)\| \leq q(r)\|v - w\| \quad (36)$$

for all  $v, w \in U(x_0, r) \subseteq U(x_0, R)$  for some nondecreasing function  $q$  on  $[0, R]$ . Then as in [3], condition (5) will be true for

$$A_1(t + \|h\|, t) = \int_t^{t+\|h\|} q(s) ds. \quad (37)$$

For an application of this choice of  $A$  to the solution of nonlinear integral equations using Newton's method see [3] and the example that follows.

Moreover we can choose  $q(r) = k$  for all  $r \in [0, R]$  and for some  $k > 0$ . Then with  $A$  as in (a) above

$$A(t + \|h\|, t) \leq k\|h\|, \quad A(t + \|h\|, t) \leq A_1(t + \|h\|, t)$$

and

$$A_1(t + \|h\|, t) \leq k\|h\|.$$

These estimates (especially the first one) show that we can improve on the distances  $\|y_n - x_n\|$  and  $\|x_n - x^*\|$  as we did in [1]-[3] for Newton and Newton-like methods.

(c) Estimates (30) and (31) can sometimes be solved explicitly for  $\|x_n - x^*\|$  for all  $n \geq 0$ . For example we can choose  $q(r) = k$  and  $A$  as  $A_1$  in (b) above.

### III. APPLICATIONS

We will complete this study by providing an example that shows how to choose the constants  $\beta$ ,  $s_0$  and the functions  $q(r)$  and  $A_1$  (given by (36) and (37) respectively).

Let us assume that  $F_1 = F_2 = C = C[0, 1]$  the space of continuous functions on  $[0, 1]$  equipped with the usual supremum norm. We consider Uryson-type nonlinear integral equations of the form

$$F(x)(t) = x(t) - \int_0^1 K(t, s, x(s)) ds. \quad (38)$$

We assume for simplicity that  $x_0 = 0$ , and make use of the following standard result whose proof can be found for example in [3].



**Theorem 3.** The Lipschitz condition (36) for the Fréchet-derivative  $F'$  of the operator (38) holds if and only if the second derivative  $K''_{uu}(t, s, u)$  exists for all  $t$  and almost all  $s$  and  $u$ , and

$$\sup_{t \in [0,1]} \int_0^1 \sup_{|u| \leq r} |K''_{uu}(t, s, u)| ds < \infty. \quad (39)$$

Moreover, the left hand side in relation (39) is then the minimal Lipschitz constant  $q(r)$  in (36). Moreover, the constants  $\eta$  and  $\beta$  are given by

$$\eta = \sup_{t \in [0,1]} \left| \int_0^1 K(t, s, 0) ds + \int_0^1 r(t, s) \int_0^1 K(s, p, 0) dp ds \right| \quad (40)$$

and

$$\beta = 1 + \sup_{t \in [0,1]} \int_0^1 |r(t, s)| ds, \quad (41)$$

where  $r(t, s)$  is the resolvent kernel of the equation

$$h(t) - \int_0^1 K''_{uu}(t, s, 0) h(s) ds = - \int_0^1 K(t, s, 0) ds. \quad (42)$$

Let us consider a simple example. Suppose that  $K(t, s, u) = c_1(t)c_2(s)c_3(u)$  with two continuous functions  $c_1$  and  $c_2$ , and  $c_3 \in C^2$ . We set

$$d_1 = \int_0^1 c_2(s) ds, \quad d_2 = \int_0^1 c_1(s)c_2(s) ds. \quad (43)$$

Then relation (42) becomes

$$h(t) = [c'_4 c'_3(0) - d_1 c_3(0)] c_1(t), \quad (44)$$

where

$$c'_4 = \int_0^1 c_2(s) h(s) ds. \quad (45)$$

Substituting relation (44) into (45), one may calculate  $c'_4$  and hence find the resolvent kernel  $r(t, s)$  in case  $d_2 c'_3(0) < 1$ , to get

$$r(t, s) = \frac{c_1(t)c_2(t)c'_3(0)}{1 - d_2 c'_3(0)}. \quad (46)$$

Using relations (39)–(41) we obtain

$$q(t) = \|c_1\| d_1 \sup_{|u| \leq r} |c'_3(u)|, \quad (47)$$

$$\eta = \frac{d_1 c_3(0)}{1 - d_2 c'_3(0)} \|c_1\| \quad (48)$$

and

$$\beta = 1 + \frac{d_1 c_3(0)}{1 - d_2 c'_3(0)} \|c_1\|. \quad (49)$$

Thus, in this case a complete and explicit computation of the function  $T$  given by relation (21) is possible. As an example, let us choose

$$c_1(t) = \frac{3}{10}t, \quad c_2(s) = \frac{2}{10}s \quad \text{and} \quad c_3(u) = \frac{1}{3}u^3 + \frac{1}{10}u + 1$$

on  $[0, 1]$ . Then using relations (43), (46)–(49), and (6) we get

$$d_1 = \frac{1}{10}, \quad d_2 = \frac{2}{100}, \quad d_2 c'_3(0) = \frac{2}{1000} < 1,$$

$$r(t, s) = \frac{30}{499}ts, \quad q(r) = \frac{6}{100}r, \quad s_0 = \frac{15}{499}, \quad \beta = \frac{514}{499}.$$



The hypotheses of Theorem 1 will be satisfied if

$$r^7 - 85.47093804r^5 + .026310589r^4 + 2033.815799r^3 - 1.702850901r^2 - 917.420396r + 27.55261348 \leq 0$$

and

$$R \leq 5.688635222 = R_0.$$

That is, the hypotheses of Theorem 1 will be satisfied if we choose

$$R_1 = .03007 \quad \text{and} \quad R = R_0.$$

The conclusions of Theorem 1 can now follow.

## REFERENCES

- [1] Argyros, I.K. The Newton-Kantorovich method under mild differentiability conditions and the Ptak error estimates, Monatshefte für Mathematik, Vol. 109, No. 3, (1990), 191-203.
- [2] Argyros, I.K. On the solution of equations with nondifferentiable operators and the Ptak errors estimates, BIT, 90, (1990), 752-754.
- [3] Argyros, I.K. and Szidarovszky, F. The theory and applications of iteration methods, C.R.C. Press, Inc. Boca Raton, Florida, U.S.A. (1993).
- [4] Argyros, I. K. and Chen, D. A. A fourth order iterative method in Banach spaces, Appl. Math. Letters.
- [5] Chen, X. and Yamamoto, T. Convergence domains of certain iterative methods for solving nonlinear equations, Numer. Funct. Anal. Optimiz. 10, (1 and 2), (1989), 37-48.
- [6] Potra, F.A. On an iterative algorithm of order 1.839... for solving nonlinear operator equations, Numer. Funct. Anal. Optimiz. 7(1), (1984-85), 75-106.
- [7] Zabrejko, P.P. and Nguen, D.F. The majorant method in the theory of Newton-Kantorovich approximations and the Ptak-error estimates, Numer. Funct. Anal. Optimiz. 9, (5 and 6), (1987), 671-684.



# On the convergence of a Chebysheff-Halley-type method using divided differences of order one.

Ioannis K. Argyros

Department of Mathematics. Cameron University  
Lawton, OK 73505, U.S.A.

## Abstract

Local and semi-local convergence theorems are provided for a Chebysheff-Halley-type method in Banach spaces using divided differences of order one. The order of convergence of our method is almost three.

**1. Introduction.** In this study we are concerned with the problem of approximating a locally unique solution  $x^*$  of the equation

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

in a Banach space  $E_1$ , where  $F$  is a nonlinear operator defined on some convex subset  $D$  of  $E_1$  with values in a Banach space  $E_2$ .

The method of tangent hyperbolas or the Chebysheff-Halley-type method is a cubically convergent iterative procedure for solving nonlinear equations. This method has been generalized for nonlinear operator equations in Banach spaces by [5]-[8]. Recently a Chebysheff-Halley-type method of order three was introduced in [4]. In particular the method is given by

$$y_n = x_n - F'(x_n)^{-1} F(x_n) \quad (2)$$

$$H_n = - F'(x_n)^{-1} F''(x_n) (y_n - x_n) \quad (3)$$

$$x_{n+1} = y_n - \frac{1}{2} F'(x_n)^{-1} \left[ I - \frac{1}{2} H_n \right]^{-1} F''(x_n) (y_n - x_n)^2 \quad (4)$$

for some  $x_0 \in D$  and all  $n \geq 0$ .

Here  $F'(x_n)$ ,  $F''(x_n)$  denote the first and second Frechet-derivatives of  $F$  evaluated at  $x = x_n$ . Note that these operators are linear and bilinear respectively. With the exception of some special cases these generalizations have no practical value because they require an evaluation of the second Frechet-derivative at each step (which means a number of function evaluations proportional with the cube of the dimension of the space). Discretized versions of the above method will be useful in numerical computations. That is why we introduce the following iterations



$$L_n = -F'(x_n)^{-1}([x_n, y_n] - [x_n, x_n]) \quad (6)$$

$$x_{n+1} = y_n - F'(x_n)^{-1}(I - L_n)^{-1}([x_n, y_n] - [x_n, x_n])(y_n - x_n) \quad (7)$$

for all  $n \geq 0$  and some  $x_0 \in D$ ,

and

$$y_n = x_n - [x_{n-1}, x_n]^{-1}F(x_n) \quad (8)$$

$$M_n = -[x_{n-1}, x_n]^{-1}([x_n, y_n] - [x_n, x_n]) \quad (9)$$

$$x_{n+1} = y_n - [x_{n-1}, x_n]^{-1}(I - M_n)^{-1}([x_n, y_n] - [x_n, x_n])(y_n - x_n) \quad (10)$$

for all  $n \geq 0$  and some  $x_{-1}, x_0 \in D$ .

By  $[x, y]$ ,  $x, y \in E_1$  we denote a generalized divided difference of order one. We provide semi-local and local convergence theorems for the above iterations using the majorant theory.

Some applications are also provided.

## II. Convergence Analysis.

We will need the following definition [3], [7].

**Definition.** Let  $F$  be a nonlinear operator defined on a subset  $D$  of a linear space  $E_1$  with values in another linear space  $E_2$  and let  $x, y$  be two points of  $D$ . A linear operator from  $E_1$  into  $E_2$ , denoted  $[x, y]$ , which satisfies the condition

$$[x, y](x - y) = F(x) - F(y) \quad (11)$$

is called a divided difference of order one of  $F$  at the points  $x$  and  $y$ .

The condition (11) does not uniquely determine the divided difference, with the exception of the case when  $E_1$  is one-dimensional. An operator  $[.,.] : D \times D \rightarrow L(E_1, E_2)$  satisfying condition (11) is called a divided difference of order one of  $F$  on  $D$ . If we fix the first variable, we get an operator

$$[x_0, .] : D \rightarrow L(E_1, E_2). \quad (12)$$

Let  $v, w$  be two points of  $D$ . A divided difference of the operator (12) at the points  $v, w$  will be called a divided difference of the second order of  $F$  at the points  $z, v, w$  and will be denoted by  $[z, v, w]$ . We have by definition

$$[z, v, w](v - w) = [z, v] - [z, w]. \quad (13)$$

Obviously,  $[z, v, w]$  belongs in  $L(E_1, L(E_1, E_2))$ . From now on we assume that  $E_1, E_2$  are Banach spaces and  $D$  is a convex subset of  $E_1$ .

We can now prove the following result:



Theorem 1. Let  $F$  be a nonlinear operator defined on a convex subset  $D$  of a Banach space  $E_1$  with values in a Banach space  $E_2$ .

Suppose:

(a) the equation  $F(x) = 0$  has a solution  $x^* \in D$  at which the Frechet-derivative  $F'(x^*)$  exists and is invertible with  $\|F'(x^*)^{-1}\| \leq \beta_1$

(b) the nonlinear operator  $F$  has divided differences of order one satisfying the Lipschitz condition

$$\|[x, y] - [u, v]\| \leq p'_2 (\|x - u\| + \|y - v\|) \quad (14)$$

for all  $x, y, u, v \in D$  and some  $p'_2 > 0$ .

(c) The ball  $U(x^*, r_1) = \{x \in E_2 \mid \|x - x^*\| \leq r_1\}$  is included in  $D$ , where  $r_1$  is a positive number satisfying the inequalities

$$16p_1^3 r_1^3 - 22p_1^2 r_1^2 + 9p_1 r_1 - 1 < 0 \quad (15)$$

and

$$4p_1 r_1 < 1, \text{ with } p_1 \geq \beta_1 p'_1. \quad (16)$$

Then the iteration  $\{x_n\}$   $n \geq 0$  generated by (5) - (7) for  $x_0 \in U(x^*, r_1)$  is well defined, remains in  $U(x^*, r_1)$  for all  $n \geq 0$  and converges to  $x^*$  in such a way that the following estimates are satisfied:

$$\|y_n - x^*\| \leq \frac{p_1}{1 - 2p_1 \|x_n - x^*\|} \|x_n - x^*\|^2 \quad (17)$$

and

$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq \|y_n - x^*\| + \frac{p_1}{1 - p_1 (2\|x_n - x^*\| + \|x_n - y_n\|)} \|x_n - y_n\|^2 \quad (18)$$

for all  $n \geq 0$ .

Proof. We will show that  $F'(x_n)$  and  $I - L_n$  are invertible for all  $n \geq 0$ . Note first that condition (14) implies that  $F'(x) = [x, x]$  for all  $x \in D$ . Using condition (14) we now have

$$\begin{aligned} \|F'(x^*)^{-1}\| \|F'(x_n) - F'(x^*)\| &= \|F'(x^*)^{-1}\| \|[x_n, x_n] - [x^*, x^*]\| \\ &\leq p_1 (\|x_n - x^*\| + \|x_n - x^*\|) \\ &\leq 2p_1 r_1 < 4p_1 r_1 < 1 \text{ by hypothesis (16).} \end{aligned} \quad (19)$$

It now follows from the Banach lemma on invertible operators that  $F'(x_n)$  is invertible for all  $x_n \in U(x^*, r_1)$  and

$$\|F'(x_n)^{-1}\| \leq \frac{\beta_1}{1 - 2p_1 \|x_n - x^*\|}. \quad (20)$$



Moreover, by (6), (14) and (20) we get for all  $n \geq 0$

$$\begin{aligned} \|L_n\| &\leq \|F'(x_n)^{-1}\| \cdot \|([x_n, y_n] - [x_n, x^*])\| \\ &\leq \frac{p_1 \|x_n - y_n\|}{1 - 2p_1 \|x_n - x^*\|}. \end{aligned} \quad (21)$$

Furthermore, by (5), (14) and (20) we obtain in turn from the approximation

$$\begin{aligned} y_n - x^* &= x_n - x^* - F'(x_n)^{-1}G(x_n) = F'(x_n)^{-1}[F'(x_n)(x_n - x^*) - (F(x_n) - F(x^*))] \\ &= F'(x_n)^{-1} \int_0^1 [F'(x_n) - F'(x^* + t(x_n - x^*))] dt (x_n - x^*) \end{aligned} \quad (22)$$

that

$$\begin{aligned} \|y_n - x^*\| &\leq \frac{2p_1}{1 - 2p_1 \|x_n - x^*\|} \int_0^1 \|x_n - (x^* + t(x_n - x^*))\| dt \|x_n - x^*\| \\ &\quad - \frac{p_1}{1 - 2p_1 \|x_n - x^*\|} \|x_n - x^*\|^2 \\ &\leq \frac{p_1 r_1}{1 - 2p_1 r_1} \|x_n - x^*\| \leq \|x_n - x^*\| \leq r_1, \quad (\text{by 16}) \end{aligned} \quad (23)$$

which shows estimate (17) and that  $y_n \in U(x^*, r_1)$  for all  $n \geq 0$ .

From estimate (21), we now have that

$$\|L_n\| \leq \frac{p_1 (\|x_n - x^*\| + \|y_n - x^*\|)}{1 - 2p_1 \|x_n - x^*\|} \leq \frac{2p_1 r_1}{1 - 2p_1 r_1} < 1,$$

which shows that  $I - L_n$  invertible and

$$\|(I - L_n)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|L_n\|} \leq \frac{1 - 2p_1 \|x_n - x^*\|}{1 - p_1 (2\|x_n - x^*\| + \|x_n - y_n\|)}. \quad (24)$$

It now follows from (7), (14) and (24) that

$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq \|y_n - x^*\| + \frac{p_1}{1 - p_1 (2\|x_n - x^*\| + \|x_n - y_n\|)} \|x_n - y_n\|^2,$$

which shows (18) for all  $n \geq 0$ .

Moreover from (18), (20), (24) and the triangle inequality we obtain that

$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq c \|x_n - x^*\|, \quad (25)$$



where

$$0 < c = \frac{p_1 r_1}{1 - 2p_1 r_1} + \frac{p_1 r_1 (1 - p_1 r_1)}{(1 - 2p_1 r_1) [(1 - 2p_1 r_1)^2 - p_1 r_1 (1 - p_1 r_1)]} < 1$$

by hypothesis (15).

Furthermore from estimate (25) we deduce that  $x_{n+1} \in U(x^*, r_1)$  and  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x^*$ .

That completes the proof of the theorem.

Similarly, we can prove the following theorem:

**Theorem 2.** Let  $F$  be a nonlinear operator defined on a convex subset  $D$  of a Banach space  $E_1$  with values in a Banach space  $E_2$ .

Suppose:

(a) the equation  $F(x) = 0$  has a solution  $x^* \in D$  at which the Frechet-derivative  $F'(x^*)$  exists and is invertible with  $\|F'(x^*)^{-1}\| \leq \beta_2$ ;

(b) the nonlinear operator  $F$  has divided differences of order one satisfying the Lipschitz condition

$$\| [x, y] - [u, v] \| \leq p'_2 (\|x - u\| + \|y - v\|)$$

for all  $x, y, u, v \in D$  and some  $p'_2 > 0$ .

(c) The ball  $U(x^*, r_2)$  is included in  $D$ , where  $r_2$  is a positive number satisfying the inequalities

$$16p_2^3 r_2^3 - 24p_2^2 r_2^2 + 10p_2 r_2 - 1 < 0$$

and

$$4p_2 r_2 < 1, \text{ with } p_2 \geq \beta_2 p'_2.$$

Then the iteration generated by (8)-(10) for  $x_{-1}, x_0 \in U(x^*, r_2)$  is well defined, remains in  $U(x^*, r_2)$  for all  $n \geq 0$  and converges to  $x^*$  in such a way that the following estimates are satisfied:

$$\|y_n - x^*\| \leq \frac{p_2 (\|x_{n-1} - x^*\| + \|x_n - x^*\|)}{1 - p_2 (\|x_{n-1} - x^*\| + \|x_n - x^*\|)} \|x_n - x^*\|$$

and

$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq \|y_n - x^*\| + \frac{p_2 \|x_n - y_n\|^2}{1 - p_2 (\|x_n - x^*\| + \|x_{n-1} - x^*\| + \|x_n - y_n\|)}$$

for all  $n \geq 0$ .



Moreover, we can show the following result:

**Theorem 3.** Let  $F$  be a nonlinear operator defined on a convex subset  $D$  of a Banach space  $E_1$  with values in a Banach space  $E_2$ .

Suppose:

(a) there is a point  $x_0 \in D$  at which the Frechet-derivative  $F'(x_0)$  exists and is invertible and let numbers  $t_0$  and  $s_0$  satisfy  $t_0 = 0$ ,  $s_0 \geq \|y_0 - x_0\|$ ; with

$$\|F'(x_0)^{-1}\| \leq \beta_3; \quad (26)$$

(b) the nonlinear operator  $F$  has divided differences of order one satisfying the Lipschitz condition

$$\|[x, y] - [u, v]\| \leq p'_3 (\|x - u\| + \|y - v\|) \quad (27)$$

for all  $x, y, u, v \in D$  and some  $p'_3 > 0$ .

(c) there exists a minimum nonnegative number  $r_3$  satisfying

$$T(r_3) \leq r_3, \quad (28)$$

where the real function  $T$  is defined by

$$T(r) = s_0 + \frac{p_3 r^2}{1 - 2p_3 r} \left[ 3 + \frac{p_3 r + 1}{1 - 2p_3 r} \right]. \quad (29)$$

(d) the following estimates are true:

$$4p_3 r_3 < 1, \quad p_3 \geq p'_3 \beta_3, \quad (30)$$

and

$$U(x_0, r_3) \subset D. \quad (31)$$

Then

(i) the scalar iterations  $\{t_n\}$  and  $\{s_n\}$   $n \geq 0$  defined by

$$s_{n+1} = t_{n+1} + \frac{p_3}{1 - 2p_3(t_{n+1} - t_0)} \left\{ (t_{n+1} - s_n)^2 + 2(s_n - t_n)(t_{n+1} - s_n) + \frac{p_3(s_n - t_n)^3}{1 - p_3[2(t_n - t_0) + (s_n - t_n)]} + \frac{[1 - 2p_3(t_n - t_0)](s_n - t_n)^2}{1 - p_3[2(t_n - t_0) + (s_n - t_n)]} \right\} \quad (32)$$

and

$$t_{n+1} = s_n + \frac{p_3(s_n - t_n)^2}{1 - p_3[2(t_n - t_0) + (s_n - t_n)]}, \quad (33)$$



are monotonically increasing with  $0 \leq t_n \leq s_n \leq t_{n+1} \leq s_{n+1}$  and bounded above by their common limit, which is number  $r_3$ .

(ii) The iteration  $\{x_n\}$   $n \geq 0$  generated by (5)-(7) is well defined, remains in  $U(x_0, r_3)$  for all  $n \geq 0$  and converges to some  $x^* \in U(x_0, r_3)$ , which is the unique solution of the equation  $F(x) = 0$  in  $U(x_0, r_3)$ . Moreover, the following estimates are true for all  $n \geq 0$ ;

$$\|x_{n+1} - y_n\| \leq t_{n+1} - s_n \quad (34)$$

$$\|y_{n+1} - x_{n+1}\| \leq s_{n+1} - t_{n+1} \quad (35)$$

$$\|x_n - x^*\| \leq r_3 - t_n \quad (36)$$

and

$$\|y_n - x^*\| \leq r_3 - s_n. \quad (37)$$

Proof. (i) We first note that by hypothesis (30) the number  $r_3$  is the unique positive solution of the scalar equation  $T(r) - r = 0$  on  $[0, r_3]$ . From hypothesis (26) and (33) (for  $n = 0$ ), we get  $0 = t_0 \leq s_0 \leq t_1$ . By assuming that  $t_k \leq s_k \leq t_{k+1}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$  we obtain  $t_{k+1} \leq s_{k+1} \leq t_{k+2} \leq s_{k+2}$  by iterations (32) and (33). Hence, the sequences  $\{t_n\}$  and  $\{s_n\}$   $n \geq 0$  are monotonically increasing. From hypotheses (26) and (30) we get  $t_0 \leq s_0 \leq t_1 \leq r_3$ . Let us assume that  $t_k \leq s_k \leq t_{k+1} \leq r_3$  for  $k = 0, 1, 2, \dots, n-1$ . Then from iterations (32) and (33) we can have in turn

$$\begin{aligned} t_{n+2} \leq t_{n+1} + \frac{p_3}{1 - 2p_3 r_2} \{ (t_{n+1} - s_n)^2 + 2(s_n - t_n)(t_{n+1} - s_n) \\ + \frac{p_3(s_n - t_n)^3}{1 - p_3[2(t_n - t_0) + (s_n - t_n)]} + \frac{[1 - 2p_3(t_n - t_0)](s_n - t_n)^2}{1 - p_3[2(t_n - t_0) + (s_n - t_n)]} + (s_{n+1} - t_{n+1})^2 \}. \end{aligned} \quad (38)$$

But, we also have

$$\begin{aligned} (t_{n+1} - s_n)^2 + 2(s_n - t_n)(t_{n+1} - s_n) &\leq 2(t_{n+1} - s_n)(t_{n+1} - t_n) \leq 2r_3(t_{n+1} - t_n) \leq 2r_3^2, \\ (s_n - t_n)^2 + (s_{n-1} - t_{n-1})^2 + \dots + (s_0 - t_0)^2 &\leq r_3[(s_n - t_n) + (s_{n-1} - t_{n-1}) + \dots + (s_0 - t_0)] \\ &\leq r_3(s_n - t_0) \leq r_3^2, \\ (s_n - t_n)^3 + (s_{n-1} - t_{n-1})^3 + \dots + (s_0 - t_0)^3 &\leq r_3^2[(s_n - t_n) + (s_{n-1} - t_{n-1}) + \dots + (s_0 - t_0)] \\ &\leq r_3^2(s_n - t_0) \leq r_3^3, \end{aligned}$$



and

$$\frac{1}{1-p_3[2(t_n-t_0)+(s_n-t_n)]} \leq \frac{1}{1-2p_3r_3}.$$

Therefore, relation (38) becomes

$$t_{n+2} \leq T(r_3) \leq r_3 \text{ by hypotheses (28).}$$

That completes the proof for part (i).

(ii) As in the proof of Theorem 1, we can show that for all  $n \geq 0$

$$\|F'(x_n)^{-1}\| \leq \frac{\beta_3}{1-2p_3\|x_n-x_0\|} \quad (39)$$

and

$$\|(I-L_n)^{-1}\| \leq \frac{1-2p_3\|x_n-x_0\|}{1-p_3(2\|x_n-x_0\|+\|x_n-y_n\|)}. \quad (40)$$

Using the approximation

$$\begin{aligned} F(x_{n+1}) &= \int_0^1 ([y_n + t(x_{n+1}-y_n), y_n + t(x_{n+1}-y_n)] - [y_n, y_n])(x_{n+1}-y_n) dt \\ &\quad + ([y_n, y_n] - [x_n, x_n])(x_{n+1}-y_n) + (I-L_n)^{-1}F'(x_n)^{-1}([x_n, y_n] - [x_n, x_n]) \\ &\quad + \int_0^1 ([x_n + t(y_n-x_n), x_n + t(y_n-x_n)] - [x_n, x_n])(y_n-x_n) dt \\ &\quad + (I-L_n)^{-1} \int_0^1 ([x_n + t(y_n-x_n), x_n + t(y_n-x_n)] - [x_n, x_n]) \\ &\quad - ([x_n, y_n] - [x_n, x_n])(y_n-x_n) dt, \end{aligned}$$

(5)-(7), (27), (39) and (40) we obtain in turn

$$\begin{aligned} \|y_{n+1} - x_{n+1}\| &\leq \|F'(x_{n+1})\| \cdot \|F(x_{n+1})\| \\ &\leq \frac{\delta_{n+1}}{1-2p_3\|x_{n+1}-x_0\|} = \frac{p_3}{1-2p_3\|x_{n+1}-x_0\|} \left\{ \|x_{n+1}-y_n\|^2 + 2\|x_n-y_n\|\|x_{n+1}-y_n\| \right. \\ &\quad \left. + \frac{p_3\|x_n-y_n\|^3}{1-p_3(2\|x_n-x_0\|+\|x_n-y_n\|)} + \frac{1-2p_3\|x_n-x_0\|}{1-p_3(2\|x_n-x_0\|+\|x_n-y_n\|)} \|x_n-y_n\|^2 \right\} \quad (41) \end{aligned}$$



$$\leq \frac{p_3}{1-2p_3(t_{n+1}-t_0)} \left\{ (t_{n+1}-s_n)^2 + 2(s_n-t_n)(t_{n+1}-s_n) + \frac{p_3(s_n-t_n)^3}{1-p_3[2(t_n-t_0)+(s_n-t_n)]} + \frac{[1-2p_3(s_n-t_0)](s_n-t_n)^2}{1-2p_3[2(t_n-t_0)+(s_n-t_n)]} \right\} = s_{n+1}-t_{n+1},$$

where we assumed that (34) and (35) are true for  $k = 0, 1, 2, \dots, n-1$  and also used the estimates

$$\begin{aligned} \|x_{n+1}-x_0\| &\leq \|x_{n+1}-y_0\| + \|y_0-x_0\| \leq \|x_{n+1}-y_n\| + \|y_n-y_0\| + \|y_0-x_0\| \\ &\leq \dots \leq (t_{n+1}-s_n) + (s_n-s_0) + s_0 \leq t_{n+1} \leq r_3 \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \|y_{n+1}-x_0\| &\leq \|y_{n+1}-y_0\| + \|y_0-x_0\| \leq \|y_{n+1}-x_{n+1}\| + \|x_{n+1}-y_n\| + \|y_n-y_0\| + \|y_0-x_0\| \\ &\leq \dots \leq (s_{n+1}-t_{n+1}) + (t_{n+1}-s_n) + (s_n-s_0) + s_0 \leq s_{n+1} \leq r_3. \end{aligned}$$

That is,  $x_n, y_n \in U(x_0, r_3)$  for all  $n \geq 0$ .

Moreover from (6), (7), (27), (39) and the induction hypothesis, we obtain in turn for all  $n \geq 0$

$$\begin{aligned} \|x_{n+1}-y_n\| &\leq \|F'(x_n)^{-1}\| \cdot \|(I-L_n)^{-1}\| \cdot \| [x_n, y_n] - [x_n, x_n] \| \|y_n-x_n\| \\ &\leq \frac{p_3(s_n-t_n)^2}{1-p_3[2(t_n-t_0)+(s_n-t_n)]} = t_{n+1}-s_n, \end{aligned}$$

which shows (34).

Furthermore from estimates (34), (35) and the triangle inequality we obtain

$$\|y_{n+1}-y_n\| \leq s_{n+1}-s_n$$

and

$$\|x_{n+1}-x_n\| \leq t_{n+1}-t_n \quad n \geq 0.$$

It now follows from the above estimates that the sequences  $\{x_n\}$  and  $\{y_n\}$   $n \geq 0$  are Cauchy in a Banach space and as such they both converge to some  $x^* \in U(x_0, r_3)$  with  $F(x^*) = 0$  (by (5)).

Finally to show uniqueness, we assume that there exists another solution  $y^*$  of equation (1) in  $U(x_0, r_3)$ . Then from hypothesis (27) we have in turn

$$\left\| F'(x_0)^{-1} \int_0^1 \|y^* + t(x^*-y^*), y^* + t(x^*-y^*)\| - [x_0, x_0] \| dt \right\|$$



$$\leq 2p_3 \int_0^1 \|y^* + t(x^* - y^*) - x_0\| dt$$

$$\leq 2p_3 \int_0^1 ((1-t)\|x_0 - y^*\| + t\|x_0 - x^*\|) dt$$

$\leq 2p_3 r_3 < 1$ , by hypothesis (28).

It now follows that the linear operator

$$\int_0^1 F'(y^* + t(x^* - y^*)) dt = \int_0^1 [y^* + t(x^* - y^*), y^* + t(x^* - y^*)] dt$$

is invertible. From this fact and the approximation

$$F(x^*) - F(y^*) = \int_0^1 F'(y^* + t(x^* - y^*))(x^* - y^*) dt,$$

it now follows that  $x^* = y^*$ .

That completes the proof of the theorem.

We will now find the order of convergence for the iterations  $\{x_n\}$ ,  $\{t_n\}$   $n \geq 0$  by introducing standard Newton-Kantorovich hypotheses. Let  $r_3$  be the minimum nonnegative zero of the equation  $T(r) - r = 0$  on  $(0, r_3]$ . Moreover, let us assume that there exist nonnegative constants  $K, \beta, \eta, h, c$  such that

$$\beta K \leq 2p_3, \quad \eta \leq s_0, \quad c \leq 2h = 2K\beta\eta \leq 1, \quad r_3 \leq 2\eta$$

and

$$c = 1 - \left( \frac{2\eta}{r_3} - 1 \right)^2, \text{ provided that } r_3 \neq 0.$$

If  $r_3 = 0$ , we choose  $\eta = s_0 = h = 0$ , and our conditions reduce to  $\beta K \leq 2p_3$  only.

We define the scalar iterations for all  $n \geq 0$  by

$$v_n = w_n - \frac{g(w_n)}{g'(w_n)} w_0 = 0,$$

$$w_{n+1} = v_n - \frac{k(v_n - w_n)^2}{2g' \left( \frac{v_n + w_n}{2} \right)},$$



the scalar function

$$g(t) = \frac{k}{2} t^2 - \frac{1}{\beta} t + \frac{\eta}{\beta}$$

and the constants

$$z_1 = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{h} \eta, \quad z_2 = \frac{1 + \sqrt{1 - 2h}}{h} \eta$$

and

$$\theta = \frac{z_1}{z_2}.$$

With the above hypotheses the following are true

$$r_3 \leq z_1, w_n \leq t_n, v_n \leq s_n, w_{n+1} - v_n \leq t_{n+1} - s_n \text{ and } v_n - w_n \leq s_n - t_n \text{ for all } n \geq 0.$$

The first inequality reduces to showing that  $c \leq 2h$ , which is true by hypothesis. The rest of the inequalities can be proved easily by using induction on  $n$ . Indeed for  $n = 0$ , we have in turn by using the above hypotheses that

$$w_1 = v_0 - \frac{k(v_0 - w_0)^2}{2g'(\frac{v_0 + w_0}{2})} \leq s_0 + \frac{p_3(s_0 - t_0)^2}{1 - p_3(s_0 + t_0)} = t_1 \Rightarrow w_1 \leq t_1,$$

$$w_1 - v_0 = -\frac{k(v_0 - w_0)^2}{2g'(\frac{v_0 + w_0}{2})} \leq \frac{p_3(s_0 - t_0)^2}{1 - p_3(s_0 + t_0)} = t_1 - s_0 \Rightarrow w_1 - v_0 \leq t_1 - s_0.$$

$$v_1 = w_1 - \frac{g(w_1)}{g'(w_1)} = w_1 + \frac{\beta k}{2(1 - \beta k w_1)} [(w_1 - v_0)^2$$

$$+ \frac{\beta k (v_0 - w_0)^3}{2(1 - \beta k w_0)} : \left( 1 - \frac{k\beta (v_0 - w_0)}{2(1 - \beta k w_0)} \right)]$$

$$\leq t_1 + \frac{p_3}{1 - 2p_3 t_1} \left[ (t_1 - s_0)^2 + \frac{\beta k (v_0 - w_0)^3}{2(1 - \beta k w_0)} : \left( 1 - \frac{k\beta (v_0 - w_0)}{2(1 - \beta k w_0)} \right) \right].$$

we would like to show that

$$\frac{p_3(v_0 - w_0)}{1 - 2p_3 w_0} : \left( 1 - \frac{p_3(v_0 - w_0)}{1 - 2p_3 w_0} \right) \leq \frac{2p_3(s_0 - t_0) + (1 - 2p_3 t_0)}{1 - p_3(t_0 + s_0)}.$$



But, we can have that

$$\frac{p_3(v_0 - w_0)}{1 - 2p_3w_0} : \left(1 - \frac{p_3(v_0 - w_0)}{1 - 2p_3w_0}\right) \leq \frac{p_3(v_0 - w_0)}{1 - p_3(t_0 + s_0)}.$$

So it is enough to show that

$$p_3(v_0 - w_0) \leq 2p_3(s_0 - t_0) + 1 - 2p_3t_0,$$

which is true by hypothesis.

Therefore, we obtain

$$v_1 \leq t_1 + \frac{p_3}{1 - 2p_3t_1} \left[ (t_1 - s_0)^2 + \frac{2p_3(s_0 - t_0)^3 + (1 - 2p_3t_0)(s_0 - t_0)^2}{1 - p_3(t_0 + s_0)} \right] = s_1$$

$\Rightarrow v_1 \leq s_1$  and from the same arguments  $v_1 - w_1 \leq s_1 - t_1$ . That is we have showed the validity of all the above inequalities for  $n = 0$ . We now assume that they are true for

$k = 0, 1, 2, \dots, n-1$ . The induction will be completed easily if we repeat the proof we gave for  $n = 0$ , by observing that we can replace the subscripts 1 by  $k+1$  and 0 by  $k$ .

From the proof of the theorem it can now be easily seen that the uniqueness of the solution  $x^*$  can be extended in the ball  $U(x_0, r)$  with  $z_1 \leq r \leq z_2$ , provided that  $U(x_0, r) \subseteq D$

and  $2\beta(r_3 + z_2) < 1$ .

The following estimates can now be proved easily

$$\alpha(w_n) = \frac{k}{2} a_n b_n, \quad a_n = z_1 - w_n, \quad b_n = z_2 - w_n, \quad b_n = a_n + (1 - \theta^2) \frac{\eta}{\theta},$$

$$a_n = \frac{a_{n-1}^3 (a_{n-1} + b_{n-1})}{(a_{n-1} + b_{n-1})^3 - a_{n-1} b_{n-1} (a_{n-1} + b_{n-1})},$$

$$b_n = \frac{b_{n-1}^3 (b_{n-1} + a_{n-1})}{(a_{n-1} + b_{n-1})^3 - a_{n-1} b_{n-1} (a_{n-1} + b_{n-1})},$$

$$e_n = \frac{a_n}{b_n} = (e_{n-1})^3 \frac{e_{n-1} + 1}{1 + e_{n-1}}, \quad 0 \leq e_{n-1} \leq \theta \leq 1,$$

$$e_{n-1}^3 \leq \frac{2 + \theta}{1 + 2\theta} e_{n-1}^3 \leq e_n \leq 2e_{n-1}^3,$$

$$a_n = z_1 - w_n \leq c_n = \frac{(1 - \theta^2) \eta}{1 - \theta^3} \theta^{3^n - 1}.$$



Note that  $\theta < 1$ , provided that  $2h < 1$ . From the above error estimates it now follows that

$r_3 = z_1$ , and

$$r_3 - t_n \leq a_n \leq c_n \text{ for all } n \geq 0,$$

from which it follows that the order of convergence of the iterations  $\{x_n\}$  and  $\{t_n\}$   $n \geq 0$  is almost three.

A similar analysis for the order of convergence can be given for the iteration  $\{x_n\}$   $n \geq -1$  generated by (8)-(10) via Theorem 4.

The conditions  $c \leq 2h$  and  $r_0 \leq 2\eta$  are used only to show that  $r_0 \leq r_1$ . If these conditions are violated we can reason as follows. For sufficiently large  $n$  and since

$[x_n, y_n] - [x_n, x_n] = [x_n, y_n, x_n] (y_n - x_n)$ , the operator  $[x_n, y_n, x_n]$  can be approximated by  $\frac{1}{2} F''(x_n)$ . Here  $[x_n, y_n, x_n]$  denotes a divided difference of order two for  $F$  and  $F''(x_n)$

the second Frechet derivative of  $F$  evaluated at  $x = x_n$ . Replace now the difference operator in

approximation (7) by  $\frac{1}{2} F''(x_n)$  and use the same letters for the new iteration  $\{x_n\}$

$n \geq 0$ . Moreover, let us assume that  $\|F'(x)\| \leq M$ ,  $\|F''(x) - F''(y)\| \leq N \|x - y\|$  for all

$$x, y \in D, \quad \|F'(x_0)^{-1}\| \leq \beta, \quad \|y_0 - x_0\| \leq \eta, \quad \text{and} \quad \left(3M^2 + \frac{2N}{3\beta}\right)^{\frac{1}{2}} \leq K.$$

Then the sequence  $\{w_n\}$   $n \geq 0$  majorizes the sequence  $\{x_n\}$  also and in particular

$\|x_n - x^*\| \leq c_n$  for all  $n \geq 0$ . (See also, [4].)

**Proposition 1.** Under the hypotheses of Theorem 3, the following estimates are also available for all  $n > 0$

$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq \frac{\delta_{n+1}}{1 - p_3 (\|x^* - x_0\| + \|x_{n+1} - x_0\|)} \leq r_3 - t_{n+1}$$

and

$$\|y_n - x_n\| \leq \|x_n - x^*\| + \frac{p_3 \|x_n - x^*\|^2}{1 - 2p_3 \|x_n - x_0\|}$$

where  $\delta_{n+1}$  is given by (41).

**Proof.** From hypothesis (27) we obtain in turn

$$\|F'(x_0)\| \int_0^1 \left\| \left( [x^* + t(x_{n+1} - x^*), x^* + t(x_{n+1} - x^*)] - [x_0, x_0] \right) \right\| dt$$



$$\leq 2p_3 \int_0^1 \|(1-t)(x^* - x_0) + t(x_{n+1} - x_0)\| dt \leq p_3 (\|x^* - x_0\| + \|x_{n+1} - x_0\|)$$

$$\leq 2p_3 r_3 < 1$$

by hypothesis (28). It now follows that the linear operator

$$A_{n+1} = \int_0^1 [x^* + t(x_{n+1} - x^*), x^* + t(x_{n+1} - x^*)] dt \text{ is invertible and}$$

$$\|A_{n+1}^{-1}\| \leq \frac{\beta_3}{1 - p_3 (\|x^* - x_0\| + \|x_{n+1} - x_0\|)} \text{ for all } n \geq 0.$$

The results now easily follow from the approximations

$$x_{n+1} - x^* = (A_{n+1}^{-1})F(x_{n+1}),$$

$$y_n - x_n = x^* - x_n + [x_n, x_n]^{-1} \left\{ \int_0^1 [x_n + t(x^* - x_n), x_n + t(x^* - x_n)] - [x_n, x_n] \right\} (x^* - x_n) dt,$$

the above inequality, the triangle inequality, (8) and (41).

The proof is now complete.

Note that the second inequality above can be solved for  $\|x_n - x^*\|$  to provide a lower bound on this estimate for all  $n \geq 0$ .

Similarly, we can prove the result:

**Theorem 4.** Let  $F$  be a nonlinear operator defined on a convex subset  $D$  of a Banach space  $E_1$  with values in a Banach space  $E_2$ .

Suppose:

(a) there is a point  $x_0 \in D$  at which the Frechet-derivative  $F'(x_0)$  exists and is invertible with  $\|F'(x_0)^{-1}\| \leq \beta_4$ , and let numbers  $t_1, t_0$  and  $s_0$  satisfy

$$\|y_0 - x_0\| \leq s_0 - x_0, 0 < \|x_1 - x_0\| \leq t_0 - t_1 \text{ and } t_1 = 0;$$

(b) the nonlinear operator  $F$  has divided differences of order one satisfying the Lipschitz condition

$$\|[x, y] - [u, v]\| \leq p_4 (\|x - u\| + \|y - v\|)$$

for all  $x, y, u, v \in D$  and some  $p_4 > 0$ .



(c) There exists a minimum nonnegative number  $r_4$  satisfying

$$T_1(r_4) \leq r_4$$

where the real function  $T_1$  is defined by

$$T_1(r) = s_0 + \frac{p_4 r^2}{1 - 2p_4 r} \left[ 3 + \frac{p_4 r + 2}{1 - 2p_4 r} \right].$$

(d) The following estimates are true:

$$4p_4 r_4 < 1, \quad p_4 \geq p_4 \beta_4,$$

and

$$U(x_0, r_4) \subseteq D.$$

Then

(i) the scalar iterations  $\{t_n\}$   $n \geq -1$  and  $\{s_n\}$   $n \geq 0$  defined by

$$\begin{aligned} s_{n+1} = & t_{n+1} + \frac{p_4}{1 - p_4[(t_n - t_0) + (t_{n+1} - t_0)]} \left\{ (t_{n+1} - s_n)^2 + [(s_n - t_{n-1}) + (s_n - t_n)](t_{n+1} - s_n) \right. \\ & + \frac{p_4(s_n - t_n)^2}{1 - p_4[(s_n - t_n) + (t_{n-1} - t_0) + (t_n - t_0)]} (s_n - t_{n-1}) \\ & \left. + \frac{1 - p_4[(t_{n-1} - t_0) + (t_n - t_0)]}{1 - p_4[(s_n - t_n) + (t_{n-1} - t_0) + (t_n - t_0)]} [2(s_n - t_n) + (t_n - t_{n-1})](s_n - t_n) \right\} \quad n \geq 0 \end{aligned}$$

and

$$t_{n+1} = s_n + \frac{p_4(s_n - t_n)^2}{1 - p_4(t_{n-1} - t_0 + t_n - t_0)} \quad n \geq 1$$

are monotonically increasing with  $0 \leq t_n \leq s_n \leq t_{n+1} \leq s_{n+1}$  and bounded above by their common limit, which is number  $r_4$ .

(ii) The iteration  $\{x_n\}$   $n \geq -1$  generated by (8)-(10) is well defined, remains in  $U(x_0, r_4)$  for all  $n \geq -1$  and converges to some  $x^* \in U(x_0, r_4)$ , which is the unique solution of the equation  $F(x) = 0$  in  $U(x_0, r_4)$ . Moreover the following estimates are true for all  $n \geq 0$ :

$$\|x_{n+1} - y_n\| \leq t_{n+1} - s_n,$$

$$\|y_{n+1} - x_{n+1}\| \leq s_{n+1} - t_{n+1},$$

$$\|x_n - x^*\| \leq r_4 - t_n$$

and

$$\|y_n - x^*\| \leq r_4 - s_n.$$



As in Proposition 1 we can show:

**Proposition 2.** Under the hypotheses of Theorem 4, the following estimates are also available for all  $n \geq 0$

$$\begin{aligned} \|x_{n+1} - x^*\| \leq p_4 \left\{ \|x_{n+1} - s_n\|^2 + [\|y_n - x_{n-1}\| + \|y_n - x_n\|] \|x_{n+1} - y_n\| \right. \\ \left. + \frac{p_4 \|y_n - x_n\|^2 \|y_n - x_{n-1}\|}{1 - p_4 [\|y_n - x_n\| + \|x_{n-1} - x_0\| + \|x_n - x_0\|]} \right. \\ \left. + \frac{1 - p_4 [\|x_{n-1} - x_0\| + \|x_n - x_0\|]}{1 - p_4 [\|y_n - x_n\| + \|x_{n-1} - x_0\| + \|x_n - x_0\|]} [2\|y_n - x_n\| + \|x_n - x_{n-1}\|] \|y_n - x_n\| \right\} \\ [1 - p_4 (\|x^* - x_0\| + \|x_{n+1} - x_0\|)]^{-1} \leq r_4 - t_{n+1} \end{aligned}$$

and

$$\|y_n - x_n\| \leq \|x^* - x_n\| + \frac{p_4 \|x_n - x^*\| (\|x_n - x_{n-1}\| + \|x^* - x_n\|)}{1 - p_4 (\|x_n - x_0\| + \|x_{n-1} - x_0\|)}.$$

Note that the second inequality above can be solved for  $\|x_n - x^*\|$  to provide a lower band on this estimate for all  $n \geq 0$ .

**Remarks (1).** The approximation for  $F(x_{n+1})$  in Theorem 4 is given by

$$\begin{aligned} F(x_{n+1}) = \int_0^1 ([y_n + t(x_{n+1} - y_n), y_n + t(x_{n+1} - y_n)] - [y_n, y_n]) (x_{n+1} - y_n) dt \\ + ([y_n, y_n] - [x_{n-1}, x_n]) (x_{n+1} - y_n) \\ + (I - M_n)^{-1} [x_{n-1}, x_n]^{-1} ([x_n, y_n] - [x_{n-1}, x_n]) \int_0^1 [x_n + t(y_n - x_n), \\ [x_n + t(y_n - x_n) - [x_{n-1}, x_n]] (y_n - x_n) dt \\ + (I - M_n)^{-1} \int_0^1 ([x_n + t(y_n - x_n), x_n + t(y_n - x_n)] - [x_{n-1}, x_n]) - ([x_n, y_n] - [x_n, x_n]) (y_n - x_n) dt \end{aligned}$$

for all  $n \geq 0$ .

(2) Theorems 1 and 2 can be used to solve autonomous differential equation of the form

$$F'(x) = P(F(x))$$

where  $P$  is a known operator. It then follows that since  $F'(x^*) = P(0)$ , the linear operator  $F'(x^*)$  is known despite the fact that  $x^*$  is not known.



(3) The iterations introduced here are faster than the ones introduced for the Euler-Chebysheff method in [5]-[8]. These authors used hypotheses on divided differences of order one and two, whereas we only used hypotheses on divided differences of order one. Similar results can be proved for the Euler-Chebysheff method.

(4) The main idea for the introduction of our iterations came from the observation that due to (13) the linear operator  $\frac{1}{2} F''(x_n)(y_n - x_n)$  appearing in (3) and (4) can be approximated by  $[x_n, y_n] - [x_n, x_n]$ . The approximations  $[x_n, x_n] - [y_n, y_n]$  and  $[x_n, x_n] - x_n, y_n$  can also be used. The linear operator  $[x_{n-1}, x_n]$  can also be replaced by  $[x_n, x_{n-1}]$  or  $[y_{n-1}, x_n]$ .

(5) The hypothesis on  $F'(x_0)$  in Theorem 4 can easily be replaced by a hypotheses on the starting linear operator  $[x_{n-1}, x_0]$ . Similar results can then follow. Moreover, similar results can easily be developed if in all previous iterations we set  $F'(x_n) = F'(x_0)$  and  $[x_{n-1}, x_n] = [x_{-1}, x_0]$  for all  $n \geq 0$  (the convergence will then be slower).

(6) Similar theorems can be proved if the Lipschitz hypotheses on the divided differences are replaced by Holder hypotheses of the form

$$q(\|x - y\|^p + \|y - v\|^p)$$

for  $p \in [0, 1]$  and some  $q > 0$ , [1], [2], [3].

(7) Our results can also be extended to include nondifferentiable operators [2], [3]. Let us consider the equation

$$F_1(x) = F(x) + Q(x),$$

where  $F$  is as before and  $Q$  satisfied estimates of the form

$$\|Q(x) - Q(y)\| \leq d\|x - y\|$$

for all  $x, y \in D$  and some  $d > 0$ .

Then leave the derivative  $F'(x)$  as it is in (6) say, and replace  $F(x)$  by  $F_1(x)$  in (5).

The hypotheses (15) and (16) will change to

$$\frac{p_1 r_5^2}{1 - 2p_1 r_5} + \frac{p_1 \left( r_5 + \frac{p_1 r_5^2 + p_5 r_5}{1 - 2p_1 r_5} \right)^2}{1 - p_1 \left( 3r_5 + \frac{p_1 r_5^2 + p_5 r_5}{1 - 2p_1 r_5} \right)} < r_5$$

and

$$\frac{p_1 r_5 + p_5}{1 - 2p_1 r_5} < 1,$$



respectively, where  $p_5 \geq \beta_1 d'$  and  $r_5$  is a positive number satisfying the above

inequalities. In estimate (17) an extra term of the form  $\frac{p_5 \|x_n - x^*\|}{1 - 2p_1 \|x_n - x^*\|}$  will be added at the right hand side.

The hypotheses (c) in Theorem 2 will change to

$$\frac{2p_2 r_6^2}{1 - 2p_2 r_6} + \frac{p_2 \left( r_6 + \frac{2p_2 r_6^2 + p_6 r_6}{1 - 2p_2 r_6} \right)^2}{1 - p_2 \left( 3r_6 + \frac{2p_2 r_6^2 + p_6 r_6}{1 - 2p_2 r_6} \right)} < r_6$$

and

$$\frac{2p_2 r_6 + p_6}{1 - 2p_2 r_6} < 1,$$

respectively, where  $p_6 \geq \beta_2 d'$  and  $r_6$  is a positive number satisfying the above

inequalities. An extra term of the form  $\frac{p_6 \|x_n - x^*\|}{1 - 2p_2 \|x_n - x^*\|}$  will be added at the right hand side of the estimate for  $\|y_n - x^*\|$ . Similar changes will take place for Theorems 3 and 4.

The results of all the previous theorems will then hold for the equation  $F_1(x) = 0$ .

(8) For some applications of these results to nonlinear integral and differential equations, we can refer the reader to [3] and the references there. We also note that the above error bounds can be further improved if we use Ptak-type estimates (see, [2] for Newton's method).

(9) The constants  $p_1, p_2, p_3$  and  $p_4$  as well as the construction of the divided differences can easily be found in finite dimensional spaces. See the elegant description by Potra in [7].

(10) We finally note that all the above results remain valid if in the Lipschitz condition,  $[u, v]$  is replaced by  $F'(z)$  for all  $z \in D$ .

(11) From the proof of Theorem 3, (28) and (32) it can easily be seen that the bracket in the definition of  $T$  (see(31)) can be replaced by 4, whereas the expression inside the braces in (32) can be replaced by  $(t_{n+1} - t_n)^2 + 2(s_n - t_n)^2 + (s_{n+1} - t_{n+1})^2$ . The bracket in the definition of  $T_1$  can be replaced by 6, whereas the expression inside the braces in the definition of  $s_{n+1}$  can be replaced by

$$(t_{n+1} - t_{n-1})^2 + 2(s_n - t_n)^2 + 2(s_n - t_{n-1})(s_n - t_n) + (s_{n+1} - t_{n+1})^2.$$



## References

- [1] Argyros, I.K. The Newton-Kantorovich method under mild differentiability conditions and the Ptak error estimates. Monatshefte für Mathematik, Vol. 109, No. 3, (1990), 191-203.
- [2] \_\_\_\_\_. On the solution of equations with nondifferentiable operators and the Ptak error estimates, BIT, 90, (1990), 752-754.
- [3] Argyros, I.K. and Szidarovszky, F. The theory and application of iteration methods, C.R.C. Press, Inc. Boca Raton, Florida, (1993).
- [4] Argyros, I.K. and Chen, D. A note on the Halley method in Banach spaces, J. Appl. Math and Comp. 58 (1993), 1 215-224.
- [5] Mervetecova, M.A. An analog of the process of tangent hyperbolas for general functional equations (Russian), Dokl. Akad. Nauk. SSSR, 88, (1953), 611-614.
- [6] Necepureenko, M.T. On Chebyshev's method for functional equations (Russian), Usephi. Mat. Nauk. 9, (1954), 163-170.
- [7] Potra, F.A. On an iterative algorithm of order 1.839 ... for solving nonlinear operator equations Numer. Funct. Anal. and Optimiz. 7, (1), (1984-85), 75-106.
- [8] Ul'm, S. Iteration methods with divided differences of the second order (Russian), Dokl. Akad. Nauk. SSSR, 158 (1964), 55-58. Soviet Math. Dokl. 5, 1187-1190.

## 1- Introduction

In this paper we study the problem of approximating a locally unique solution  $x^*$  of the equation

$$F(x) = 0, \quad (1)$$

in a Banach space  $X$ , where  $F$  is a nonlinear operator defined on some convex subset  $D$  of  $X$  with values in a Banach space  $Y$ . Let  $x_0 \in D$  and define the Chebyshev method for all  $n \geq 0$  by

$$y_n = x_n - F'(x_n)^{-1} F(x_n), \quad (2)$$

$$x_{n+1} = y_n - \frac{1}{2} F''(x_n)^{-1} F''(x_n) F'(x_n)^{-1} F(x_n) = x_n^2. \quad (3)$$

<sup>1</sup>Department of Mathematics, Carleton University, London, Ontario, N6Y 9K1, USA

<sup>2</sup>Department of Mathematical Sciences, University of Arkansas, Fayetteville, Arkansas 72704, USA

<sup>3</sup>Department of Mathematics, University of Kentucky, Lexington, KY 40506, USA



# A Simplified Proof Concerning the Convergence and Error Bound of A Rational Cubic Method in a Banach Space and Applications to Nonlinear Integral Equations

I.K.Argyros\* Dong Chen †and Q. Qian ‡

## Abstract

In this study, under standard Newton-Kantorovich conditions, we establish the Kantorovich-type convergence theorem for the Chebyshev method in a Banach space.

## 1 Introduction

In this paper we study the problem of approximating a locally unique solution  $x^*$  of the equation

$$F(x) = 0, \quad (1)$$

in a Banach space  $X$ , where  $F$  is a nonlinear operator defined on some convex subset  $D$  of  $X$  with values in a Banach space  $Y$ . Let  $x_0 \in D$  and define the Chebyshev method for all  $n \geq 0$  by

$$y_n = x_n - F'(x_n)^{-1}F(x_n), \quad (2)$$

$$x_{n+1} = y_n - \frac{1}{2}F'(x_n)^{-1}F''(x_n)(y_n - x_n)^2. \quad (3)$$

\*Department of Mathematics, Cameron University, Lawton, Oklahoma 73505, USA

†Department of Mathematical Sciences, University of Arkansas, Fayetteville, Arkansas 72701, USA

‡Department of Mathematics, University of Kentucky, Lexington, KY 40506, USA



Here  $F'(x_n)$  and  $F''(x_n)$  denote the first and second Frechet derivatives of  $F$  evaluated at  $x = x_n$ . Note that  $F'(x_n)$  is a linear operator whereas  $F''(x_n)$  is a bilinear operator for all  $n \geq 0$  [1], [2]. If the sequence  $\{x_n\}$  defined by (2) and (3) converges to a point  $x^* \in D$ , then  $x^*$  is a zero of equation (1). The Kantorovich-type convergence analysis for the Chebyshev method in the classical form has been studied by Candela and Marquina in [3]. We reduce all extra assumptions given by above authors. In fact we define an equivalent form of the Chebyshev method in a Banach space setting and we show that under standard Newton-Kantorovich assumptions [4-7] the Chebyshev method converges faster to a zero  $x^*$  of equation (1) than Newton's method. An explicit form of the error bound will be given. An application of the Chebyshev method to an integral equation appearing in radiative transfer [1] and [2] will be also investigated. We also show that previous results cannot be applied to solve general quadratic equations in a Banach space.

## 2 Convergence Analysis

We will first need the following results:

**Lemma 2.1** *Let  $F : D \subset X \rightarrow Y$ . Assume:*

- (a) *The nonlinear operator  $F$  is twice Frechet differentiable on the  $D$ ;*
- (b) *The iterates  $x_n$  generated by (2) and (3) belong in  $D$  and  $F'(x_n)^{-1}$  exists for all  $n \geq 0$ .*

*Then the following approximation is true for all  $n \geq 0$ :*

$$\begin{aligned} F(x_{n+1}) = & \int_0^1 F''[y_n + t(x_{n+1} - y_n)](1-t)dt(x_{n+1} - y_n)^2 \\ & - \frac{1}{2} \int_0^1 [F''[x_n + t(y_n - x_n)](y_n - x_n)F'(x_n)^{-1}F''(x_n)(y_n - x_n)^2 \\ & + \int_0^1 \{F''[x_n + t(y_n - x_n)](1-t) - \frac{1}{2}F''(x_n)\}dt(y_n - x_n)^2. \end{aligned}$$

**Proof:** We start with the approximation



$$\begin{aligned}
F(x_{k+1}) &= F(x_{n+1}) - F(y_n) - F'(y_n)(x_{n+1} - y_n) \\
&\quad + F(y_n) + F'(y_n)(x_{n+1} - y_n) \\
&= \int_0^1 F''[y_n + t(x_{n+1} - y_n)](1-t)dt(x_{n+1} - y_n)^2 \\
&\quad + F(y_n) - F(x_n) - F'(x_n)(y_n - x_n) \\
&\quad + [F'(y_n) - F'(x_n)](x_{n+1} - y_n) + F'(x_n)(x_{n+1} - y_n)
\end{aligned}$$

We need to use the facts:

$$\begin{aligned}
F(x_n) + F'(x_n)(y_n - x_n) &= 0, \\
x_{n+1} - y_n &= -\frac{1}{2}F'(x_n)^{-1}F''(x_n)(y_n - x_n)^2,
\end{aligned}$$

and

$$F(y_n) = \int_0^1 F'''[x_n + t(y_n - x_n)](1-t)dt(y_n - x_n)^2$$

to simplify the above and then the conclusion of the lemma will follow. Now we can state our main results.

**Theorem 2.1** *Let  $F : D \subset X \rightarrow Y$ ,  $X$  and  $Y$  are real Banach spaces, and  $D$  is an open convex domain. Assume that  $F$  has 2nd order continuous Frechet derivatives on  $D$  and for given an initial value  $x_0 \in D$  that the following standard Newton-Kantorovich conditions are satisfied:*

$$\|F'''(x)\| \leq M, \|F'''(x) - F'''(y)\| \leq N \|x - y\|, \quad (4)$$

$$\|F'(x_0)^{-1}\| \leq \beta, \|F'(x_0)^{-1}F(x_0)\| \leq \eta, \quad (5)$$

$$M[1 + \frac{N}{3M^2\beta}]^{1/2} \leq K, h = K\beta\eta \leq 0.485, \quad (6)$$

$$\overline{U(x_0, t^*)} \subset D, \quad (7)$$

where  $\overline{U(x, r)} = \{x' \in X \mid \|x' - x\| \leq r\}$ , and we have set

$$g(t) = \frac{1}{2}Kt^2 - \frac{1}{\beta}t + \frac{\eta}{\beta}, \quad (8)$$



$$t^* = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{h} \eta, \quad (9)$$

$$t^{**} = \frac{1 + \sqrt{1 - 2h}}{h} \eta, \quad (10)$$

$$\theta = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{1 + \sqrt{1 - 2h}}. \quad (11)$$

Then the iteration generated by (2) and (3) is well defined for all  $n \geq 0$  and converges to a unique zero  $x^*$  of equation (1) in  $\bar{U}(x_0, t)$  for  $t^* \leq t < t^{**}$ . Moreover  $x_n, y_n \in \bar{U}(x_0, t^*)$ , for all  $n \geq 0$ . Furthermore the following error estimates are true for all  $n \geq 0$ :

$$\|x_n - x^*\| \leq t^* - t_n \leq \frac{(1 - \theta^2)\eta}{1 - \frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{2}\theta]^{3^n}} [\sqrt{2}\theta]^{3^n - 1}, \quad (12)$$

where  $\{t_n\}_{n=0}^\infty$  and  $\{s_n\}_{n=0}^\infty$  are defined by

$$s_n = t_n - \frac{g(t_n)}{g'(t_n)}, \quad (13)$$

$$t_{n+1} = s_n - \frac{1}{2} \frac{g''(t_n)}{g'(t_n)} (s_n - t_n)^2, \quad (14)$$

with the starting point  $t_0 = 0$ .

**Proof:** It suffices to show that the following items are true for all  $n$  by mathematical induction:

$$(I_n): \quad x_n \in \bar{U}(x_0, t_n);$$

$$(II_n): \quad \|F'(x_n)^{-1}\| \leq -g'(t_n)^{-1};$$

$$(III_n): \quad \|y_n - x_n\| \leq s_n - t_n;$$

$$(IV_n): \quad y_n \in \bar{U}(x_0, s_n);$$

$$(V_n): \quad \|x_{n+1} - y_n\| \leq t_{n+1} - s_n.$$

It is easy to check in the case when  $n = 0$  by the initial conditions. Now assume that the above statements are true for a fixed  $n \geq 1$

$(I_{n+1})$ : We can have



$$\begin{aligned}\|x_{n+1} - x_0\| &\leq \|x_{n+1} - y_n\| + \|y_n - x_n\| + \|x_n - x_0\| \\ &\leq (t_{n+1} - s_n) + (s_n - t_n) + (t_n - t_0) = t_{n+1}.\end{aligned}$$

(II<sub>n+1</sub>): from the approximation

$$F'(x_{n+1}) - F'(x_0) = \int_0^1 F''[x_0 + t(x_{n+1} - x_0)] dt (x_{n+1} - x_0),$$

so we obtain in turn

$$\begin{aligned}\|F'(x_{n+1}) - F'(x_0)\| &\leq M \|x_{n+1} - x_0\| \leq K(t_{n+1} - t_0) = Kt_{n+1} \\ &< Kt^* = K \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{h} \eta = K \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{K\beta\eta} \eta \\ &= K \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{\beta} \leq \frac{1}{\beta} \leq \frac{1}{\|F'(x_0)^{-1}\|},\end{aligned}$$

and by the Banach lemma,  $F'(x_{n+1})^{-1}$  exists and

$$\begin{aligned}\|F'(x_{n+1})^{-1}\| &\leq \frac{\|F(x_0)^{-1}\|}{1 - \|F'(x_0)^{-1}\| \|F'(x_{n+1}) - F'(x_0)\|} \\ &\leq \frac{\beta}{1 - \beta K \|x_{n+1} - x_0\|} = \frac{1}{\frac{1}{\beta} - K \|x_{n+1} - x_0\|} \\ &\leq \frac{1}{\frac{1}{\beta} - K(t_{n+1} - t_0)} \leq \frac{1}{\frac{1}{\beta} - Kt_{n+1}} = -g'(t_{n+1})^{-1}.\end{aligned}$$

(III<sub>n+1</sub>): By using the identity in the lemma 2.1, we can estimate  $F(x_{n+1})$  to obtain

$$\begin{aligned}\|F(x_{n+1})\| &\leq \frac{M}{2} \|x_{n+1} - y_n\|^2 + \frac{1}{2} \frac{M^2}{\frac{1}{\beta} - M \|x_n - x_0\|} \|y_n - x_n\|^3 \\ &\quad + \frac{N}{6} \|y_n - x_n\|^3 \\ &\leq \frac{M}{2} \|x_{n+1} - y_n\|^2 + \frac{\frac{M^2}{2} + \frac{N}{6\beta}}{\frac{1}{\beta} - M \|x_n - x_0\|} \|y_n - x_n\|^3 \\ &\leq \frac{K}{2} (t_{n+1} - s_n)^2 + \frac{K^2 (s_n - t_n)^3}{2(\frac{1}{\beta} - Kt_n)} = g(t_{n+1}).\end{aligned}$$



Moreover, we have

$$\begin{aligned}\|y_{n+1} - x_{n+1}\| &= \| -F'(x_{n+1})^{-1} \| \|F(x_{n+1})\| \\ &\leq \|F'(x_{n+1})^{-1}\| \|F(x_{n+1})\| \\ &\leq -g'(t_{n+1})^{-1}g(t_{n+1}) = s_{n+1} - t_{n+1}.\end{aligned}$$

(IV<sub>n+1</sub>): we also deduce that

$$\begin{aligned}\|y_{n+1} - x_0\| &\leq \|y_{n+1} - x_n\| + \|x_{n+1} - y_n\| + \|y_n - x_n\| + \|x_n - x_0\| \\ &\leq (s_{n+1} - t_{n+1}) + (t_{n+1} - s_n) + (s_n - t_n) + (t_n - t_0) = s_{n+1}.\end{aligned}$$

(V<sub>n+1</sub>): From (1), we have

$$x_{n+2} - y_{n+1} = -\frac{1}{2}F'(x_{n+1})^{-1}F''(x_{n+1})(y_{n+1} - x_{n+1})^2,$$

and then

$$\begin{aligned}\|x_{n+2} - y_{n+1}\| &\leq \left\| -\frac{1}{2}F'(x_{n+1})^{-1} \right\| \|F''(x_{n+1})\| \|y_{n+1} - x_{n+1}\|^2 \\ &\leq -\frac{1}{2}g'(t_{n+1})^{-1}g''(t_{n+1})(s_{n+1} - t_{n+1})^2 = t_{n+2} - s_{n+1}.\end{aligned}$$

Now we are ready to derive the error bound (12). Notice that

$$g(t_n) = \frac{K}{2}(t^* - t_n)(t^{**} - t_n),$$

and

$$g'(t_n) = -\frac{K}{2}[(t^* - t_n) + (t^{**} - t_n)].$$

It is simple calculus to show that

$$\frac{t^* - t_n}{t^{**} - t_n} = \left[ \frac{t^* - t_{n-1}}{t^{**} - t_{n-1}} \right]^3 \frac{[(t^* - t_{n-1}) + 2(t^{**} - t_{n-1})]}{[2(t^* - t_{n-1}) + (t^{**} - t_{n-1})]}.$$

Now since  $0 \leq \frac{t^* - t_{n-1}}{t^{**} - t_{n-1}} \leq 1$ , we obtain

$$\frac{t^* - t_n}{t^{**} - t_n} \leq 2 \left[ \frac{t^* - t_{n-1}}{t^{**} - t_{n-1}} \right]^3.$$

The estimate (12) now follows from the equalities  $t^* = (1+\theta)\eta$ , and  $t^{**} = t^* + \frac{(1-\theta^2)\eta}{\theta}$ .

Finally to show uniqueness, we assume that there exists a second solution  $y^*$  of the equation (1) in  $\bar{U}(x_0, t)$  for  $t \in [t^*, t^{**}]$ . We now obtain the estimate.



$$\begin{aligned}
& \| F'(\dot{x}_0)^{-1} \| \int_0^1 \| F'(x^* + t(y^* - x^*)) - F'(x_0) \| dt \\
& \leq \beta \int_{x_0}^{x^* + t(y^* - x^*)} \| F''(z) \| \| dz \| \leq \beta M \int_0^1 \| x^* + t(y^* - x^*) - x_0 \| dt \\
& \leq \beta M \int_0^1 [(1-t) \| x^* - x_0 \| + t \| y^* - x_0 \|] dt \leq \beta M(t + t^*) < 1.
\end{aligned}$$

Hence the linear operator  $\int_0^1 F'(x^* + t(y^* - x^*))dt$  is invertible. It now follows from the approximation

$$\int_0^1 F'(x^* + t(y^* - x^*))dt(y^* - x^*) = F(y^*) - F(x^*) = 0,$$

that  $x^* = y^*$ . The proof of the theorem is now complete.

### 3 Applications

In this section, we use the Theorem 2.1 to suggest some new approaches to the solution of quadratic integral equations of the form:

$$x(s) = y(s) + \alpha x(s) \int_0^1 q(s, t)x(t)dt, \quad (15)$$

in the space  $X = C[0, 1]$  of all continuous functions on the interval  $[0, 1]$  with the norm

$$\| x \| = \max_{0 \leq s \leq 1} | x(s) |. \quad (16)$$

Here we assume that  $\alpha$  is a real number called the "albedo" for scattering and the kernel  $q(s, t)$  is a continuous function of two variables with  $0 \leq s, t \leq 1$  and satisfying

$$0 < q(s, t) < 1, 0 \leq s, t \leq 1, \quad (17)$$

$$q(s, t) + q(t, s) = 1, 0 \leq s, t \leq 1. \quad (18)$$

The function  $y(s)$  is given by a continuous function defined on  $[0, 1]$ , and  $x(s)$  is the unknown function sought in  $[0, 1]$ . Equations of this type are related with the work of S. Chandrasokhar[1,2], and arise in the theories of radiative transfer, neutron



transport and in the kinetic theory of gasses. There exists an extensive literature on equations like (15) under various assumptions on the kernel  $q(s, t)$  and  $\alpha$  is a real or complex number. One can refer to the recent work in [1, 2] and the references there. Here we demonstrate that the theorem via the iterative procedures (2) and (3) provide existence results for (15). Moreover, the iterative procedures (2) and (3) converge faster than the solution of all the previous known ones. Furthermore, a better information on the location of the solution is given. Note that the cost is not higher than the corresponding one of previous methods. For simplicity, we shall assume that

$$q(s, t) = \frac{s}{s+t}, 0 \leq s, t \leq 1. \quad (19)$$

Notice that  $q(s, t)$  satisfies (17) and (18) above. Let us now choose  $y(s) = 1$  for all  $s$  in  $[0, 1]$  and define the operator  $F$  on  $X = C[0, 1]$  by

$$F(x) = \alpha x(s) \int_0^1 \frac{s}{s+t} x(t) dt - x(s) + 1. \quad (20)$$

Note that every root of the equation  $F(x) = 0$  satisfies the equation (15). Set  $x_0(s) = 1$  and  $\alpha = 0.25$ , use the definition of the first and second Frechet derivatives of the operator  $F$  to obtain

$$M = 2 |\alpha| \max_{0 \leq s \leq 1} \left| \int_0^1 \frac{s}{s+t} dt \right| = (2 \ln 2) |\alpha| = 0.34657359,$$

$$N = 0, K = M, \beta = \|F'(1)^{-1}\| = 1.53039421, \eta \geq 0.265197107,$$

$$t^* = 0.28704852, \theta = 0.08239685, t^{**} = 3.483731664$$

and

$$\begin{aligned} \|x_n - x^*\| &\leq \frac{(1 - \theta^2)\eta}{1 - \frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{2}\theta]^{3^n}} [\sqrt{2}\theta]^{3^n - 1} \\ &= \frac{0.26339662}{1 - \frac{1}{\sqrt{2}}(0.116526742)^{3^n}} (0.116526742)^{3^n - 1} \end{aligned}$$

for all  $n \geq 0$ , which shows that  $x^*$  is unique in  $\bar{U}(x_0, t^*)$ , for  $t \in [t^*, t^{**})$ .

**Remark** (a) The results obtained in [3], [4], [6] and the references there cannot apply



to solve the above integral equations since they require  $N > 0$ . but here  $N = 0$ .

(b) In fact the above mentioned results cannot apply to solve an important class of nonlinear equations, the quadratic equations of the form

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

where  $B, L$  are bounded symmetric bilinear and bounded linear operators, and  $y \in X$  is fixed [1], [2]. Note that  $N = 0$  here also.

**Acknowledgment:** We would like to thank the referee for providing several valuable comments.

## References

- [1] I.K. Argyros, Quadratic Equations and Applications to Chandrasekhar's and Related Equations, *Bull. Austral. Math. Soc.*, 32(1988), 275-292.
- [2] I.K. Argyros, On a Class of Nonlinear Integral Equations Arising in Neutron Transport, *Aequationes Mathematicae*, 36(1988), 99-111.
- [3] V. Candela and A. Marquina, Recurrence Relations for Rational Cubic Methods II: The Chebychev Method, *Computing*, 45(1990), 355-367.
- [4] W.B. Gragg and R.A. Tapia, Optimal Error Bounds for Newton-Kantorovich Theorem, *SIAM J. Numer. Anal.*, 11 (1974), 10-13.
- [5] L.V. Kantorovich and G.P. Akilov, *Functional Analysis in Normed Spaces*, Pergamon Press, New York, 1964.
- [6] A.M. Ostrowski, *Solution of Equations in Euclidean and Banach Spaces*, Academic Press, New York, 3rd ed., 1973.
- [7] L.B. Rall, *Computational Solution of Nonlinear Operator Equations*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1969.



## ON ASYMPTOTIC PRECISION IN RESAMPLING STRATEGIES

by

M. Ruiz Espejo

Departamento de Economía Aplicada Cuantitativa

Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales

U.N.E.D.

C/. Senda del Rey, s/n

28040 Madrid

**Summary.** We provide two asymptotic results on the precision of two variance estimators of the mean of  $m$  independent subsample means of equal size  $r$  with  $srsr$  design, from a sample of size  $n > r$ , obtained with  $srs$  design from a finite population of size  $N > n$ .

### 1. Introduction

There are several recent contributions to the resampling and bootstrap in finite populations, as Bickel et al. (1984), Chao et al. (1985), McCarthy et al. (1985), Kovar et al. (1988), Čepar et al. (1990), Sitter (1992), Ruiz Espejo (1993) and Booth et al. (1994).

Consider a finite population of size  $N$ , from which a sample  $s$  (with  $srs$  design of size  $n$ , with the notation of Cassel et al., 1977) is obtained. From this sample  $s$ , a number  $m$  of independent resamples  $s_i$  are drawn (each with  $srsr$  design of size  $r < n$ ).

Denoting  $\bar{x}_s$  to the sample mean of  $s$ , and  $\bar{x}'_i$  to the sample mean of  $s_i$ , we define

$$\bar{x}''_r = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \bar{x}'_i.$$

This estimator  $\bar{x}''_r$  is unbiased for the finite population mean  $\bar{X}$ , since

$$E(\bar{x}'_i | s) = \bar{x}_s$$

and

$$E(\bar{x}'_i) = E[E(\bar{x}'_i | s)] = E(\bar{x}_s) = \bar{X}.$$

Consequently



$$E(\bar{x}_r'') = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m E(\bar{x}_i') = \bar{X}.$$

## 2. Results

The variance of  $\bar{x}_r''$  is

$$V(\bar{x}_r'') = \frac{N}{mn(N-1)} \left( \frac{N-n}{N} + \frac{n-1}{r} \right) \sigma^2$$

where  $\sigma^2$  is the finite population variance. The proof is as follows:

$$V(\bar{x}_r'') = \frac{1}{m} V(\bar{x}_i')$$

and

$$V(\bar{x}_i') = EV(\bar{x}_i'|s) + VE(\bar{x}_i'|s) = E\left(\frac{\sigma_n^2}{r}\right) + V(\bar{x}_s) =$$

$$= \frac{n-1}{nr} \frac{N}{N-1} \sigma^2 + \frac{N-n}{N-1} \frac{\sigma^2}{n} =$$

$$= \frac{N}{n(N-1)} \left( \frac{N-n}{N} + \frac{n-1}{r} \right) \sigma^2,$$

where  $\sigma_n^2$  is the variance of sample  $s$ .

Following Ruiz Espejo (1993), two unbiased estimators of  $V(\bar{x}_r'')$  are:

$$\hat{V}_1(\bar{x}_r'') = \frac{1}{m^2 n} \left( \frac{N-n}{N} + \frac{n-1}{r} \right) \sum_{i=1}^m s_i'^2$$

where  $s_i'^2$  is the sample quasivariance of  $s_i$ ; and

$$\hat{V}_2(\bar{x}_r'') = \frac{1}{m(m-1)} \sum_{i=1}^m (\bar{x}_i' - \bar{x}_r'')^2.$$

The variances of these estimators are asymptotically

$$V[\hat{V}_1(\bar{x}_r'')] \doteq \frac{1}{m^3 r^3} E\left(\frac{\mu_{4n} - \sigma_n^4}{\sigma_n^4}\right)$$

(where  $\mu_{4n}$  is the central moment of order 4 in the sample  $s$  of size  $n$ ) and

$$V[\hat{V}_2(\bar{x}_r'')] \doteq \frac{1}{m^2(r-1)^2 n} \frac{\mu_4 - \sigma^4}{\sigma^4}$$

(where  $\mu_4$  is the central moment of order 4 in the finite population of size  $N$ ). Then, asymptotically:



1. If  $r$  and  $n$  are fixed, with  $m \rightarrow \infty$ ,

$$V [\hat{V}_1(\bar{x}_r'')] < V [\hat{V}_2(\bar{x}_r'')].$$

2. If  $m$  is fixed and  $1 \ll r \ll n < N$ ,

$$V [\hat{V}_1(\bar{x}_r'')] > V [\hat{V}_2(\bar{x}_r'')].$$

**Acknowledgement.** The author is grateful to Dr. John Haslett (Trinity College, Dublin) for a helpful suggestion to improve the paper at the *2th International Conference on New Techniques and Technologies for Statistics* (Bonn, Germany, November 19-22, 1995).

### References

- [1] Bickel, P.J. and Freedman, D.A. (1984). Asymptotic normality and the bootstrap in stratified sampling. *Ann. Statist.* **12**, 470-482.
- [2] Booth, J.G., Butler, R.W. and Hall, P. (1994). Bootstrap methods for finite populations. *J. Amer. Statist. Assoc.* **89**, 1282-1289.
- [3] Cassel, C.M., Särndal, C.E. and Wretman, J.H. (1977). *Foundations of Inference in Survey Sampling*. Wiley. New York.
- [4] Čepar, D. and Radalj, Z. (1990). Some asymptotic behaviour of the bootstrap estimates on a finite sample. *Statist. Hefte* **31**, 41-46.
- [5] Chao, M.T. and Lo, S.H. (1985). A bootstrap method for finite populations. *Sankhyā A* **47**, 399-405.
- [6] Kovar, J.G., Rao, J.N.K. and Wu, C.F.J. (1988). Bootstrap and other methods to measure errors in survey estimates. *Canad. J. Statist.* **16**, 25-45.
- [7] McCarthy, P.J. and Snowden, C.B. (1985). The bootstrap and finite population sampling. *Vital and Health Statist.* (Ser. 2, No. 95), Pub. Health Service Publication 85-1369, Washington D.C., U.S. Govt. Printing Office.
- [8] Ruiz Espejo, M. (1993). Nuevos estimadores de la varianza en poblaciones finitas. *Qüestió* **17**, 203-219.
- [9] Sitter, R.R. (1992). Comparing three bootstrap methods for survey data. *Canad. J. Statist.* **20**, 135-154.



## ECONOMIC RENTIBILITY MAKING USE OF EXHAUSTIVE QUALITY CONTROL OF ACCEPTANCE

por

**M. Ruiz Espejo**

Departamento de Economía Aplicada Cuantitativa

Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales

UNED

C/. Senda del Rey, s/n

28040 Madrid

**Summary.** If we make an order of a quantity  $N$  of good units produced without defects for our reception and acceptance, and if the production corresponds to a superpopulation model of analytic study (Koop, 1986; Cassel, et al., 1977) that assigns probability  $q$  (quality) to produce a good unit, and  $1-q$  of defective, the finite population of produced units is a simple random sample with replacement of the model. In these conditions we characterize the economic rentibility expected under our exhaustive quality control, substituting defective units after their detection by previous non-destructive inspection, for others of the production, and in this way inspecting these again and substituting the new defective units for others of the production reoccurringly until the  $N$  units are good for our acceptance.

### 1. Introduction

The economic decision rule that we will obtain refers to the problem of non-destructive and exhaustive quality control of reception or acceptance. In order to do this, let us suppose that each unit produced by the supplier has a probability  $q$  in order to fulfill the agreed standards by the supplier and receiver, independently of the remaining units. This can be understood as an analytic study (Koop, 1986), or infinite population generated by the punctual binomial or Bernoulli distribution  $B(1, q)$  that represents the distribution of a generical unit that if it is good (with probability  $q$ ) it has value 1, and if the unit is defective (with probability  $1-q$ ) it has value 0. We allow that each produced unit follows this model. The total production is the finite set of units specified in a simple random sample with replacement of the previous binomial model, being independent of each other the result of the "good" or "defective" of each unit, of the remaining produced units.

We add the condition that the cost for allowing a defective unit in our acceptance is  $c_1$ , as well as the cost for inspecting a unit for our part is  $c_2$ , and the inspection is non-destructive.



From the data  $q$ ,  $c_1$  and  $c_2$  we obtain when it will be profitable, in terms expected, the exhaustive inspection until we obtain from production  $N$  good units for our acceptance. The order consists of satisfy the requisites or standards agreed upon the supplier and ourselves as receivers of  $N$  good units.

## 2. Rule of decision

The rule of decision is based on the criterion of the greatest expected profit, or equivalently, on the lowest expected cost. In order to do this, the "expected cost consequence of the defective units not substituted after the completed inspection", that we call  $C$  ( $= 0$ , in our case the quality control being exhaustive and non-destructive), plus the "expected inspection cost", that we call  $C'$ , it must be less than the "expected cost that we would have in consequence of accepting defective units in reception, in the case of not inspecting them", that we call  $C''$ . That is to say,

$$C + C' < C''.$$

Calling  $E(.)$  the operator mathematical expectation,

$$C' = c_2 NE(I).$$

Where  $I$  is the random variable "number of inspected units of the production, until getting the first good unit",

$$I = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \left( \prod_{j=1}^i X_j \right).$$

Where  $X_j$  is the random variable "number (1 or 0) of defective units per controlled unit from the production in the inspection  $j$  ( $=1,2,3,\dots$ ) until completing the  $N$  good units"; the inspection  $j=1$  consists of observing if they are good, one by one,  $N$  units produced and delivered to reception for their control. The inspection  $j$  ( $j=2,3,\dots$ ) consists of observing a number of produced units, equal to the number of defective units observed in the inspection  $j-1$ , with the objective of substituting the detected defective units in the inspection  $j-1$  for new units from production, and in this manner reoccurring in successive inspections of the substitutes until obtaining the  $N$  good units ordered.  $X_j$  is distributed binomial  $B(1,1-q)$  and it is independent of the remaining inspections due to the properties of the superpopulation model for analytic studies. Now,

$$\begin{aligned} E(I) &= E \left[ 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \left( \prod_{j=1}^i X_j \right) \right] = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \left[ \prod_{j=1}^i E(X_j) \right] = \\ &= 1 + \sum_{i=1}^{\infty} (1-q)^i = 1 + \frac{1-q}{q} = \frac{1}{q}. \end{aligned}$$



So, *Revista de Gerencia, Zaragoza, 31 (1985)*

$$C' = \frac{c_2 N}{q}.$$

On the other hand,  $C''$  is calculated as

$$C'' = c_1 N E(X_1) = c_1 N (1 - q).$$

Imposing the criterion of the lowest expected cost, we have

$$\frac{c_2 N}{q} = C + C' < C'' = c_1 N (1 - q).$$

Simplifying  $N$ , it results the searched inequality

$$\frac{c_2}{c_1} < q(1 - q).$$

In this formula,  $q$  ( $q \neq 0; 1$ ) is the quality of the received product,  $c_2$  is the cost of inspecting a unit, and  $c_1$  ( $c_1 > 0$ ) is the cost of admitting in our reception a defective unit, without the quality control and inspection proposed in this paper, and accepting the first shipment of  $N$  produced units.

### 3. Practical use of the decision rule

In practice, the costs  $c_1$  and  $c_2$  are known, but the same is not usually true for the quality  $q$ . The value  $q(1 - q)$ , as the variance of the distribution  $B(1, 1 - q)$ , it can be estimated unbiasedly by the sample quasivariance; if we take a sample of size  $n$  of distinct produced units, and  $p$  is the sample proportion of the correct units,  $E(p) = q$ . Then, the estimator  $p(1 - p)n/(n - 1)$ , the sample quasivariance, is the unbiased estimator of the variance  $q(1 - q)$ , and it converges in probability to this variance. For this, if  $n$  is sufficiently large, the condition

$$\frac{c_2}{c_1} < \frac{p(1 - p)n}{n - 1}$$

will indicate to us, in a sufficiently close manner, when the economic rentibility expected exists in carrying out the exhaustive, recurrent and non-destructive proposed quality control.

In this way our quality control represents an investment that, like any other, must produce adequate yield that justifies its implementation.

### References

- [1] Cassel, C.M., Särndal, C.E. and Wretman, J.H. (1977). *Foundations of Inference in Survey Sampling*. John Wiley. New York.
- [2] Koop, J.C. (1986). Some problems of statistical inference from sample survey data for analytic studies. *Statistics* 17, 237-247.



## ON LAPELLED SAMPLING FOR FINITE POPULATIONS

by

M. Ruiz Espejo<sup>1</sup> and L.N. Sahoo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Economía Aplicada Cuantitativa,  
Universidad a Distancia, 28040 Madrid, Spain*

<sup>2</sup>*Department of Statistics, Utkal University,  
Bhubaneswar 751004, India*

**Summary.** This paper considers an unbiased method of estimation of a finite population mean, when the population under consideration is divided into a number of subgroups, not necessarily disjoint, called lapels. We call this estimation technique as *lapelled sampling*, a generalisation of traditional stratified sampling, which requires in practice substantial use of computing.

### 1. Introduction

The traditional stratified sampling is based on the fundamental assumption that the finite population under consideration can be divided into a number of mutually disjoint subgroups (strata). But, this condition cannot be easily realizable in many practical situations. Suppose that a finite population  $U$  of size  $N$  is divided into  $m$  overlapping subgroups  $U_1, U_2, \dots, U_m$ , called lapels, such that (as in Singh, 1988)

$$U = \bigcup_{i=1}^m U_i.$$

Let  $y$  be the variable of interest taking values  $y_1, y_2, \dots, y_N$  over the units of  $U$  and we seek to estimate the population mean

$$\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i.$$

It is well known that the probability of the union of a finite number of events can be expressed as a linear function of the probabilities of the possible intersections of the events. With this background, the size (or population mean) of  $U$  can be expressed as a linear function of the sizes (or means) of all possible intersections of the lapels  $U_1, U_2, \dots, U_m$ . Thus, it is possible to construct an unbiased estimate of  $\bar{Y}$  availing sample informations from each lapel based on any desirable probability sampling design. This mechanism of estimating  $\bar{Y}$  may be called *lapelled sampling* which can also be fruitfully employed in estimating other parametric functions as totals or proportions. We next calculate the probability



of unbiasedness of the proposed sampling scheme in the case of post labelling (an analogous tool to the post stratification) and finally show that labelled sampling is a generalisation of stratified sampling.

## 2. Probability of the union of events

Let  $\{A_i\}$ ,  $i = 1, 2, \dots, m$  be a finite sequence of disjoint events. Then, by the third axiom of probability (as stated by Kolmogorov), the probability of their union is the sum of their probabilities, i.e.

$$(1) \quad p\left(\bigcup_{i=1}^m A_i\right) = \sum_{i=1}^m p(A_i).$$

But, if the events are not necessarily disjoint, then the probability of their union can be obtained as follows:

$$(2) \quad p\left(\bigcup_{i=1}^m A_i\right) = \sum_{i=1}^m p(A_i) - \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m p(A_i \cap A_j) + \sum_{i=1}^{m-2} \sum_{j=i+1}^{m-1} \sum_{k=j+1}^m p(A_i \cap A_j \cap A_k) - \dots + (-1)^{m+1} p\left(\bigcap_{i=1}^m A_i\right),$$

where the events  $A_i$ ,  $A_i \cap A_j$ ,  $A_i \cap A_j \cap A_k$ , ... and  $\bigcap_{i=1}^m A_i$  are called labelled events. The formula (2) is a generalization of (1).

## 3. Size of a finite population as a function of the sizes of the labels

If  $N = \text{card}(U)$  is the size of the finite population  $U$ , let  $N_i = \text{card}(U_i)$ ,  $N_{ij} = \text{card}(U_{ij})$  where  $U_{ij} = U_i \cap U_j$ ,  $N_{ijk} = \text{card}(U_{ijk})$  where  $U_{ijk} = U_i \cap U_j \cap U_k$ , until  $N_{12\dots m} = \text{card}(U_{12\dots m})$  where

$$U_{12\dots m} = \bigcap_{i=1}^m U_i,$$

$U_i$  being the  $i$ th label ( $i=1, 2, \dots, m$ ). Then we have the following relation (based on the theory of measurement):

$$(3) \quad N = \sum_{i=1}^m N_i - \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m N_{ij} + \sum_{i=1}^{m-2} \sum_{j=i+1}^{m-1} \sum_{k=j+1}^m N_{ijk} - \dots + (-1)^{m+1} N_{12\dots m},$$

which allows us to give the population size as a linear function of the sizes of the labels. If the label-groups  $U_i$  are disjoint two against two ( $N_{ij} = 0$ , for all  $i < j$  of  $\{1, 2, \dots, m\}$ ), then we have, as in the usual stratified sampling (Cochran, 1977),



(4)

$$N = \sum_{i=1}^m N_i.$$

Thus formula (4) can be identified as a particular case of (3).

#### 4. Lapelled population mean

Analogously to formula (3), the population mean  $\bar{Y}$  can be rewritten as

(5)

$$\begin{aligned} \bar{Y} = & \sum_{i=1}^m \frac{N_i}{N} \bar{Y}_i - \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \frac{N_{ij}}{N} \bar{Y}_{ij} + \\ & + \sum_{i=1}^{m-2} \sum_{j=i+1}^{m-1} \sum_{k=j+1}^m \frac{N_{ijk}}{N} \bar{Y}_{ijk} - \dots + (-1)^{m+1} \frac{N_{12\dots m}}{N} \bar{Y}_{12\dots m} \end{aligned}$$

where we have denoted

$$\begin{aligned} \bar{Y}_i &= \frac{1}{N_i} \sum_{q \in U_i} y_{i,q}, \\ \bar{Y}_{ij} &= \frac{1}{N_{ij}} \sum_{q \in U_{ij}} y_{ij,q}, \\ &\dots \\ \bar{Y}_{12\dots m} &= \frac{1}{N_{12\dots m}} \sum_{q \in U_{12\dots m}} y_{12\dots m,q} \end{aligned}$$

$y_{i,q}$ ,  $y_{ij,q}$ , ...,  $y_{12\dots m,q}$  being the values of  $y$  for  $q$ th units in the lapels  $U_i$ ,  $U_{ij}$ , ...,  $U_{12\dots m}$  respectively.

Denoting  $W_i = N_i/N$ ,  $W_{ij} = N_{ij}/N$ , ...,  $W_{12\dots m} = N_{12\dots m}/N$ , we can also rewrite (5) in a simpler way. If furthermore  $N_{ij} = 0$  for all  $i < j = 1, 2, \dots, m$ , then we would have

(6)

$$\bar{Y} = \sum_{i=1}^m W_i \bar{Y}_i$$

as is expected in a stratified population, a particular case of a lapelled population.

#### 5. Unbiased estimator in lapelled sampling

Allowing simple random sampling with or without replacement in each lapel, an unbiased estimator of  $\bar{Y}$  is given by

(7)

$$\begin{aligned} \bar{y}_{lp} = & \sum_{i=1}^m W_i \bar{y}_i - \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m W_{ij} \bar{y}_{ij} + \\ & + \sum_{i=1}^{m-2} \sum_{j=i+1}^{m-1} \sum_{k=j+1}^m W_{ijk} \bar{y}_{ijk} - \dots + (-1)^{m+1} W_{12\dots m} \bar{y}_{12\dots m} \end{aligned}$$



where  $\bar{y}_i, \bar{y}_{ij}, \dots, \bar{y}_{12\dots m}$  are the sample means in the lapels  $U_i, U_{ij}, \dots, U_{12\dots m}$  respectively, and are unbiased estimators for  $\bar{Y}_i, \bar{Y}_{ij}, \dots, \bar{Y}_{12\dots m}$ .

### 5.1 Necessary and sufficient condition of unbiasedness

If  $N_{ij\dots k} > 0$  with  $1 \leq i < j < \dots < k \leq m$ , the necessary and sufficient condition for  $\bar{y}_{lp}$  given in (7) to be unbiased for  $\bar{Y}$  is that the sample size assigned to the lapel  $U_{ij\dots k}$  i.e.  $n_{ij\dots k} \geq 1$  (Hanurav, 1966 and Ruiz Espejo, 1986).

### 5.2 Probability of unbiasedness with postlapelling

In some cases  $N_{12\dots m} \geq 1$ . Then a simple random sampling with replacement (srsr- $n$ ) or without replacement (srs- $n$ ) of size  $n$  can be selected from the finite population. Once selected it is decided to lapel it and then compute  $\bar{y}_{lp}$  using formula (7) as an estimator of  $\bar{Y}$ . From section 5.1, the necessary and sufficient condition for  $\bar{y}_{lp}$  to be an unbiased estimator for  $\bar{Y}$ , is that the sample size  $n_{12\dots m} \geq 1$ .

The probability of this event under srsr- $n$  design, is

$$p(n_{12\dots m} \geq 1) = 1 - p(n_{12\dots m} = 0) = 1 - (1 - W_{12\dots m})^n$$

which is asymptotically 1, if  $W_{12\dots m} > 0$ , for  $n \rightarrow \infty$ .

Under srs- $n$  design, this event has probability

$$\begin{aligned} p(n_{12\dots m} \geq 1) &= 1 - p(n_{12\dots m} = 0) = \\ &= 1 - \prod_{i=1}^n \left( \frac{N - N_{12\dots m} - i + 1}{N} \right) = \\ &= 1 - \prod_{i=1}^n \left( 1 - \frac{N_{12\dots m} + i - 1}{N} \right), \end{aligned}$$

provided  $n \leq N - N_{12\dots m}$ .

## 6. Generalisation of stratified random sampling

It is observed that when the possible lapel-groups of the population are disjoint two against two, the size and the mean of the population are respectively given by (4) and (6). Then, the formula for the estimator  $\bar{y}_{lp}$  reduces to

$$\bar{y}_{lp} = \sum_{i=1}^m W_i \bar{y}_i,$$

which is the usual unbiased estimator in stratified sampling. Thus, the lapelled sampling can be regarded as a generalisation of stratified sampling.



## References

- [1] Cochran, W.G. (1977). *Sampling Techniques* (3rd edition). John Wiley. New York.
- [2] Hanurav, T.V. (1966). Some aspects of unified sampling theory. *Sankhyā Ser. A* **28**, 175-204.
- [3] Ruiz Espejo, M. (1986). Estimable parametric functions in sampling theory. *Estadística Española* **28**, 69-73.
- [4] ——— and Sahoo, L.N. (1996). Lapelled sampling for finite populations. *COMPSTAT 1996. Proceedings in Computational Statistics*, 103. A. Prat and E. Ripoll, eds. Institut d'Estadística de Catalunya. Barcelona.
- [5] Singh, S. (1988). Estimation in overlapping clusters. *Comm. Statist. Theory Methods* **17**, 613-621.

C/ Carde del Rey, s/n  
2000 Vilad

**Summary.** In the estimation of the population mean, we prove that the use of partial auxiliary information is preferable to not use it when taking into account the gain in precision with respect to strategy simple random sampling without replacement "SRS" sample size " $n$ " (see Cochran et al., 1977) when the population size, with and without auxiliary information, are sufficiently large.

## 1. Introduction

In finite populations it is common to find oneself facing the problem of estimation of the population mean,  $\bar{Y}$ , of a certain interest variable  $y$ , with the following characteristics:

- a) Auxiliary information,  $X$ , is available in just part of the finite population of size  $N$ , let's say in  $N_1$  units.
- b) Auxiliary information is not available for the rest of the finite population. The size of this complementary part is  $N_2$ , which verifies  $N_1 + N_2 = N$ .
- c) Both  $N_1$  and  $N_2$  are sufficiently large.

## 2. The strategy proposed

When considering two strata, of relative size  $W_i = N_i/N$  ( $i = 1, 2$ ), with proportional allocation, one does not require additional information to the one already used with (proportional allocation,  $n_i/n = W_i/y$ ) except for the information in itself of the auxiliary variable, the stratified estimator which uses the regression estimator  $t_1$  in the first stratum, and being the simple mean  $\bar{y}_2$  in the second stratum, we use  $\bar{y}_2$  in the second stratum. The estimator of  $\bar{Y}$  would be the particular "semi-separate regression estimator"  $\bar{y}_{sr} = W_1 t_1 + W_2 \bar{y}_2$ . Then from Cochran (1977) under design  $n$  independently in each stratum of sample size  $n_1$  and  $n_2$ , the estimator  $\bar{y}_{sr}$  is approximately unbiased to estimate  $\bar{Y}$ , and its variance is for  $n$  fixed,

$$V(\text{Prop. } \bar{y}_{sr}) = W_1^2 \frac{N_1 - n_1}{N_1 n_1} S_{t_1}^2 (1 - f_{1sr}) + W_2^2 \frac{N_2 - n_2}{N_2 n_2} S_{\bar{y}_2}^2$$



## ON THE USE OF PARTIAL AUXILIARY INFORMATION

by

M. Ruiz Espejo

Departamento de Economía Aplicada Cuantitativa

Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales

U.N.E.D.

C/. Senda del Rey, s/n

28040 Madrid

**Summary.** In the estimation of the population mean, we prove that the use of partial auxiliary information is preferable to not use it when taking into account the gain in precision with respect to strategy (simple random sampling without replacement "srs", sample mean " $\bar{y}$ ") (see Cassel et al., 1977) when the population sizes, with and without auxiliary information, are sufficiently large.

### 1. Introduction

In finite populations it is common to find oneself facing the problem of estimation of the population mean,  $\bar{Y}$ , of a certain interest variable  $y$ , with the following characteristics:

- a) Auxiliary information,  $X_i$ , is available in just part of the finite population of size  $N$ , let's say in  $N_1$  units.
- b) Auxiliary information is not available for the rest of the finite population. The size of this complementary part is  $N_2$ , which verifies  $N_1 + N_2 = N$ .
- c) Both  $N_1$  and  $N_2$  are sufficiently large.

### 2. The strategy proposed

When considering two strata, of relative sizes  $W_i = N_i/N$  ( $i = 1, 2$ ), with proportional allocation (this does not required additional information to the one already used with (proportional allocation,  $W_1\bar{y}_1 + W_2\bar{y}_2$ ) except for the information in itself of the auxiliary variable), the stratified estimator which uses the regression estimator  $t_1$  in the first stratum, and being the sample mean  $\bar{y}_i$  in the  $i$ th stratum, we use  $\bar{y}_2$  in the second stratum, the estimator of  $\bar{Y}$  would be the particular "semiseparated regression estimator"  $\bar{y}_{st} = W_1t_1 + W_2\bar{y}_2$ , then (from Cochran, 1977) under design srs independently for each stratum of sample sizes  $n_1$  and  $n_2$ , the estimator  $\bar{y}_{st}$  is approximately unbiased to estimate  $\bar{Y}$ , and its variance is (for  $n_i$  fixed)

$$V(\text{Prop}, \bar{y}_{st}) = W_1^2 \frac{N_1 - n_1}{N_1 n_1} S_{1y}^2 (1 - \rho_{1yx}^2) + W_2^2 \frac{N_2 - n_2}{N_2 n_2} S_{2y}^2,$$



where if  $n_i = W_i n$ ,  $i = 1, 2$  (proportional allocation), we have

$$V(\text{Prop}, \bar{y}_{st}) = \left( \frac{W_1}{n} - \frac{W_1^2}{N_1} \right) S_{1y}^2 (1 - \rho_{1yx}^2) + \left( \frac{W_2}{n} - \frac{W_2^2}{N_2} \right) S_{2y}^2,$$

being  $S_{iy}^2$  the quasivariance in the stratum  $i$  of the variable  $y$ , and  $\rho_{1yx}^2$  is the correlation coefficient in the stratum 1 between the variables  $y$  and  $x$ .

### 3. Comparison

If  $N \rightarrow \infty$  so that  $W_i$  is constant, we can write the asymptotic inequalities (where  $\sigma_y^2$  is the population variance of the interest variable  $y$ )

$$\begin{aligned} V(\text{Prop}, \bar{y}_{st}) &\rightarrow \frac{1}{n} [W_1 \sigma_{1y}^2 (1 - \rho_{1yx}^2) + W_2 \sigma_{2y}^2] \leq \\ &\leq \frac{1}{n} (W_1 \sigma_{1y}^2 + W_2 \sigma_{2y}^2) \leq \frac{\sigma_y^2}{n} \end{aligned}$$

That is to say, asymptotically

$$V(\text{Prop}, \bar{y}_{st}) \leq V(\text{Prop}, W_1 \bar{y}_1 + W_2 \bar{y}_2) \leq V(srs, \bar{y}).$$

In this formula, the first inequality is due to the fact that  $\rho_{1yx}^2 \geq 0$ , and the second is due to

$$\sigma_y^2 = \sum_{i=1}^2 W_i \sigma_{iy}^2 + \sum_{i=1}^2 W_i (\bar{Y}_i - \bar{Y})^2 \geq \sum_{i=1}^2 W_i \sigma_{iy}^2,$$

being  $\sigma_{iy}^2$  the variance of stratum  $i$  for the variable  $y$ , and  $\bar{Y}_i$  is the mean in the stratum  $i$  for the interest variable  $y$ . Thus, as a conclusion, the auxiliary information, being partial, permits to improve in many cases the precision in the estimation of the population mean  $\bar{Y}$  given by the admissible estimator sample mean  $\bar{y}$  (Joshi, 1965).

### References

- [1] Cassel, C.M., Särndal, C.E. and Wretman, J.H. (1977). *Foundations of Inference in Survey Sampling*. Wiley. New York.
- [2] Cochran, W.G. (1977). *Sampling Techniques* (3rd edition). Wiley. New York.
- [3] Joshi, V.M. (1965). Admissibility and Bayes estimation in sampling finite populations II. *Ann. Math. Statist.* **36**, 1730-1742.

**Note.** This paper was originally presented at the *2nd International Conference on New Techniques and Technologies for Statistics* (Bonn, Germany, November 19-22, 1995).



## ESTIMADOR DE REGRESIÓN PARA LA VARIANZA DE UNA POBLACIÓN FINITA

por

**M. Ruiz Espejo**

Departamento de Economía Aplicada Cuantitativa

Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales

UNED

C/. Senda del Rey, s/n.

28040 Madrid

**Summary.** We propose some classes of unbiased estimators for the finite population variance which make use of one or more auxiliary variables, under simple random sampling with replacement. These proposed estimators can improve the precision of the "sample quasivariance" (unbiased UMV-estimator for a distribution-free setting). Other related questions are also treated.

### 1. Introducción

Cuando disponemos de un estimador insesgado de cierto parámetro poblacional (como la media muestral,  $\bar{y}$ , de la media poblacional,  $\bar{Y}$ , o bien la cuasivarianza muestral,  $s_y^2$ , de la varianza poblacional,  $\sigma_y^2$ ) bajo diseño de muestreo aleatorio simple con reemplazamiento -masr-, entonces podemos estimar, usando una o más variables auxiliares, la varianza poblacional de la variable de interés con un estimador de regresión múltiple que usualmente mejora la precisión del estimador insesgado UMV (uniformemente de mínima varianza) para distribución libre: la cuasivarianza muestral,  $s_y^2$ .

### 2. Estimador de regresión múltiple

Si  $y$  es la variable de interés y disponemos de  $k$  variables auxiliares  $x_j$  ( $j = 1, 2, \dots, k$ ), el estimador propuesto es

$$\hat{\sigma}_y^2 = s_y^2 + \sum_{j=1}^k b_j (T_j - t_j)$$

donde  $s_y^2$  es la cuasivarianza muestral y  $t_j$  es un estimador insesgado -bajo diseño masr- de  $T_j$  (parámetro conocido asociado a la variable auxiliar  $j$ -ésima). En principio suponemos que  $b_j$  es una constante por determinar. El estimador  $\hat{\sigma}_y^2$  es insesgado para la varianza poblacional  $\sigma_y^2$ , y su varianza es:



$$V(\hat{\sigma}_y^2) = V(s_y^2) - 2 \sum_{j=1}^k b_j \text{Cov}(s_y^2, t_j) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_i b_j \text{Cov}(t_i, t_j).$$

Esta varianza se hace mínima cuando para  $j = 1, 2, \dots, k$ ,

$$b_j = \frac{\text{Cov}(s_y^2, t_j) - \sum_{i \neq j}^k b_i \text{Cov}(t_i, t_j)}{V(t_j)} = \frac{C_{yj} - \sum_{i \neq j}^k b_i C_{ij}}{C_{jj}}$$

o bien se hace mínima si y solo si para  $j = 1, 2, \dots, k$ ,

$$C_{yj} = \sum_{i=1}^k b_i C_{ij}$$

que constituye un sistema (digamos S) de  $k$  ecuaciones lineales con  $k$  incógnitas:  $b_1, b_2, \dots, b_k$ . Estas  $b_j$  son mínimas, pues la matriz Hessiana cuyo término  $ij$  es

$$\frac{\partial^2 V(\hat{\sigma}_y^2)}{\partial b_i \partial b_j} = 2C_{ij},$$

es la matriz de covarianzas (por 2), que es simétrica, y definida o semidefinida positiva (Tucker, 1973, p. 164, ejercicio 7; Cuadras, 1991). Por ello  $V(\hat{\sigma}_y^2)$  es una función convexa en  $(b_1, b_2, \dots, b_k) \in \mathbb{R}^k$ . El sistema S no puede resolverse directamente en la práctica pues  $C_{yj}$  son covarianzas desconocidas. No obstante, los valores de  $b_j$  pueden estimarse por  $\hat{b}_j$  mediante el método de los momentos, es decir, para  $j = 1, 2, \dots, k$

$$c_{yj} = \sum_{i=1}^k \hat{b}_i C_{ij}$$

donde  $c_{yj}$  es el estimador muestral por el método de los momentos del parámetro poblacional  $C_{yj}$ . Los valores mínimos de  $b_i$  permiten estimar insesgadamente la varianza poblacional y resultan ser tales que al sustituirse verifican

$$V(\hat{\sigma}_y^2) = V(s_y^2) - \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_i b_j C_{ij} \leq V(s_y^2),$$

para  $b_i$  fijos y mínimos, pues la matriz  $(C_{ij})$  es semidefinida positiva.

Al variar  $k$  y  $t_i$  se obtienen las distintas clases de estimadores de la varianza poblacional. Algunos trabajos adicionales relacionados con la estimación de la varianza poblacional para poblaciones finitas, están recogidos en las referencias.



### 3. Algunas cuestiones relacionadas

La recta de regresión de  $v = \hat{V}(\bar{y}) = \frac{s_y^2}{n}$  sobre la media muestral  $y = \bar{y}$ , admite la expresión

$$v = \frac{\sigma_y^2}{n} + \frac{\mu_3}{n\sigma_y^2} (y - \bar{Y})$$

donde  $\mu_3$  es el momento central de orden 3 en la población finita para la variable de interés. Esto se deduce de que

$$\text{Cov} \left( \bar{y}, \frac{s_y^2}{n} \right) = \frac{\mu_3}{n^2}$$

a partir de Cramér (1953, p. 401). De aquí deducimos que  $\mu_3/(n\sigma_y^2)$  es el incremento al que tiende la estimación  $\hat{V}(\bar{y})$ , cuando  $\bar{y}$  crece una unidad. Notemos que  $\mu_3$  puede ser no nulo cuando la población finita no es simétrica. Por tanto,  $\bar{y}$  y  $\hat{V}(\bar{y})$  son dos variables dependientes en el muestreo de poblaciones finitas con diseño masr, pues como señala Cramér (1953) la media y varianzas muestrales son independientes si y solo si la población es normal, cosa imposible para una población finita.

### Referencias

- [1] Chaudhuri, A. (1978). On estimating the variance of a finite population. *Metrika* 25, 65-76.
- [2] Cramér, H. (1953). *Métodos Matemáticos de Estadística*. Aguilar. Madrid.
- [3] Cuadras, C. (1991). *Métodos de Análisis Multivariante*. PPU. Barcelona.
- [4] Ghosh, M. y Meeden, G. (1983). Estimation of the variance in finite population sampling. *Sankhyā B* 45, 362-375.
- [5] Isaki, C.T. (1983). Variance estimation using auxiliary information. *J. Amer. Statist. Assoc.* 78, 117-123.
- [6] Liu, T.P. (1974). A general unbiased estimator for the variance of a finite population. *Sankhyā* 36, 23-32.
- [7] Prasad, B. y Singh, H.P. (1992). Unbiased estimators of finite population variance using auxiliary information in sample surveys. *Comm. Statist. Theory Methods* 21, 1367-1376.
- [8] Rueda, M., Ruiz, M. y Arcos, A. (1994). À propos de l'estimation de la variance d'une population par le quotient. *XXVIème Journées de Statistique*, 542-544. Presses Académiques. Neuchâtel.
- [9] Singh, R.K. (1983). Estimation of finite population variance using ratio and product methods of estimation. *Biometrical J.* 25, 193-200.
- [10] Strauss, I. (1982). On the admissibility of estimators for the finite population variance. *Metrika* 29, 195-202.
- [11] Tucker, H.G. (1973). *Introducción a la Teoría Matemática de las Probabilidades y a la Estadística*. Vicens-Vives. Barcelona.



# DISTRIBUCIÓN DEL NÚMERO DE EXTRACCIONES CON REEMPLAZAMIENTO PARA OBTENER UNA MUESTRA DE COSTO FIJO DE UNA POBLACIÓN FINITA

por

M. Ruiz Espejo

*Departamento de Economía Aplicada Cuantitativa*

*Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales*

*Universidad a Distancia*

*C/ Senda del Rey, s/n*

*28040 Madrid*

**Summary.** We determine the quantity function of the random variable  $\varepsilon =$  "number of draws with replacement to obtain a fixed cost sample of a finite population of size  $N$ ". If the effective sample size is  $n$ ,  $1 \leq n < N$ , the random variable  $\varepsilon$  takes the values  $n, n+1, n+2, \dots$ . The methodology necessary to obtain this quantity function is similar to the proposed in Ruiz Espejo (1994). The sample mean based on  $\varepsilon$ ,  $\bar{y}_s$ , is unbiased for estimating the population mean.

## 1. Introducción

Determinamos la función de cuantía del número de extracciones con reemplazamiento para obtener una muestra de costo fijado de una población finita de tamaño  $N$ .

En el muestreo aleatorio simple sin reemplazamiento de tamaño  $n$ , con  $1 \leq n < N$ , el coste de observación es  $nc$ , siendo  $c$  el coste por unidad observada. En el muestreo aleatorio simple con reemplazamiento de tamaño  $n$ , el coste de observación es  $\nu c$ , una variable aleatoria, donde  $\nu$  es el número de unidades distintas o diferentes de la población finita seleccionadas en la muestra, cuya función de cuantía ha sido proporcionada en Ruiz Espejo (1994). El resultado demostrado en este trabajo citado consiste en la determinación de la función de cuantía de la variable aleatoria  $\nu$  que puede tomar los valores  $1, 2, 3, \dots, \min\{n, N\}$ . La función de cuantía probada es:

$$P(\nu) = \frac{\binom{N}{\nu}}{N^n} \times \sum_{i_1=1}^{n-\nu+1} \sum_{i_2=i_1+1}^{n-\nu+2} \dots \sum_{i_{\nu-1}=i_{\nu-2}+1}^{n-1} P_n^{i_1, i_2-i_1, \dots, i_{\nu-1}-i_{\nu-2}, n-i_{\nu-1}}$$



donde

$$P_m^{m_1, m_2, \dots, m_k} = \frac{m!}{m_1! m_2! \dots m_k!}$$

es el número de permutaciones con repetición de  $m$  elementos iguales, de los que  $m_1$  son iguales entre sí,  $m_2$  son iguales entre sí y distintos de los anteriores, ... hasta los  $m_k$  iguales y distintos a los anteriores, con

$$m = \sum_{i=1}^k m_i.$$

Un enfoque económico del problema es partir de un costo o presupuesto fijo  $nc$ , donde  $n$  es el número de unidades distintas observadas ( $1 \leq n < N$ ), pudiendo aparecer unidades repetidas (ya sin coste) en la muestra, hasta la selección de la unidad distinta  $(n+1)$ -ésima por primera vez que ya no se procederá a observarla y deteniendo aquí el proceso de selección de unidades con reemplazamiento y probabilidades iguales a  $1/N$  en cada extracción.

Aplicando una metodología análoga para obtener la función de cuantía de la variable aleatoria  $\nu$ , podemos deducir la función de cuantía de la variable aleatoria  $\varepsilon =$  "número de extracciones con reemplazamiento y probabilidades iguales para obtener una muestra de  $n$  unidades distintas, hasta obtener por primera vez la unidad distinta  $(n+1)$ -ésima" que no se contabiliza a efectos de coste, al no observarse esta última unidad, ni incluirse en la muestra.

## 2. Función de cuantía

Aplicando el axioma de la probabilidad condicionada y posteriormente la regla de Laplace, para  $\varepsilon = n, n+1, n+2, \dots$  tenemos la siguiente función de cuantía:

$$p(\varepsilon) = \frac{\binom{N}{n}}{N^\varepsilon} \frac{N-n}{N} \times \\ \times \left( \sum_{i_1=1}^{\varepsilon-n+1} \sum_{i_2=i_1+1}^{\varepsilon-n+2} \dots \sum_{i_{n-1}=i_{n-2}+1}^{\varepsilon-1} P_\varepsilon^{i_1, i_2-i_1, \dots, i_{n-1}-i_{n-2}, \varepsilon-i_{n-1}} \right)$$

donde  $P$  indica el número de permutaciones con repetición.

Finalmente, la media muestral  $\bar{y}_s$ , con el diseño de muestreo aleatorio simple con reemplazamiento de coste fijo  $nc$ , es un estimador insesgado para la media poblacional  $\bar{y}$ , pues haciendo uso del concepto de esperanza condicionada por la variable aleatoria obtenida en este trabajo, resulta que

$$E(\bar{y}_s) = E[E(\bar{y}_s|\varepsilon)] = E(\bar{y}) = \bar{y}.$$

Es decir, la media muestral basada en las  $\varepsilon$  unidades seleccionadas bajo el diseño de muestreo con reemplazamiento de coste fijo  $nc$ , es un estimador insesgado de la media poblacional



$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i.$$

Los conceptos manejados en este resumen pueden consultarse en las referencias citadas, así como en el libro de Cochran (1977).

### 3. Conclusiones

1. Con un esquema de muestreo básico, como es el muestreo con reemplazamiento y probabilidades iguales, pueden construirse distintos diseños muestrales como son:

1.a) Muestreo aleatorio simple con reemplazamiento de tamaño fijo.

1.b) Muestreo aleatorio simple con reemplazamiento de tamaño fijo y conservando la información muestral de las unidades distintas seleccionadas en la muestra con reemplazamiento.

1.c) Muestreo aleatorio simple con reemplazamiento de tamaño aleatorio hasta obtener una muestra de costo fijo de la población finita.

2. Con cualquiera de estos diseños de muestreo (1.a, 1.b y 1.c) el estimador media muestral es insesgado para estimar el parámetro media poblacional. Las demostraciones pueden realizarse utilizando el concepto de esperanza condicionada o directamente con la esperanza matemática.

3. La precisión de estas estrategias de muestreo es variable, si bien aumentará cuando el número de unidades distintas de la población seleccionadas en la muestra aumenta, como consecuencia de la suficiencia del dato no ordenado y sin repeticiones o duplicidad de tales unidades.

La referencia obligada para justificar el punto 3 de las conclusiones es el libro de Cassel, Särndal y Wretman (1977).

### Referencias

[1] Casas Sánchez, J.M. y Santos Peñas, J. (1995). *Introducción a la Estadística para Economía y Administración de Empresas*. Editorial Centro de Estudios Ramón Areces. Madrid.

[2] Cassel, C.M., Särndal, C.E. y Wretman, J.H. (1977). *Foundations of Inference in Survey Sampling*. John Wiley. Nueva York.

[3] Cochran, W.G. (1977). *Sampling Techniques* (Tercera edición). John Wiley. Nueva York.

[4] Fernández-Abascal, H., Guijarro, M.M., Rojo, J.L. y Sanz, J.A. (1994). *Cálculo de Probabilidades y Estadística*. Ariel Economía. Barcelona.

[5] Ruiz Espejo, M. (1994). Distribución del número de unidades distintas en una muestra aleatoria simple con reemplazamiento de una población finita. *Rev. Acad. Cienc. Zaragoza* 49, 117-118.

**Nota.** Este trabajo es un extracto de la ponencia presentada con el mismo título en la *X Reunión Anual ASEPELT España*, Albacete, 20 y 21 de Junio de 1996.



## ESTIMADOR DE REGRESIÓN PARA LA VARIANZA DE UNA POBLACIÓN FINITA

por

M. Ruiz Espejo

Departamento de Economía Aplicada Cuantitativa

Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales

UNED

C/. Senda del Rey, s/n.

28040 Madrid

**Summary.** We propose some classes of unbiased estimators for the finite population variance which make use of one or more auxiliary variables, under simple random sampling with replacement. These proposed estimators can improve the precision of the "sample quasivariance" (unbiased UMV-estimator for a distribution-free setting). Other related questions are also treated.

### 1. Introducción

Cuando disponemos de un estimador insesgado de cierto parámetro poblacional (como la media muestral,  $\bar{y}$ , de la media poblacional,  $\bar{Y}$ , o bien la cuasivarianza muestral,  $s_y^2$ , de la varianza poblacional,  $\sigma_y^2$ ) bajo diseño de muestreo aleatorio simple con reemplazamiento -masr-, entonces podemos estimar, usando una o más variables auxiliares, la varianza poblacional de la variable de interés con un estimador de regresión múltiple que usualmente mejora la precisión del estimador insesgado UMV (uniformemente de mínima varianza) para distribución libre: la cuasivarianza muestral,  $s_y^2$ .

### 2. Estimador de regresión múltiple

Si  $y$  es la variable de interés y disponemos de  $k$  variables auxiliares  $x_j$  ( $j = 1, 2, \dots, k$ ), el estimador propuesto es

$$\hat{\sigma}_y^2 = s_y^2 + \sum_{j=1}^k b_j (T_j - t_j)$$

donde  $s_y^2$  es la cuasivarianza muestral y  $t_j$  es un estimador insesgado -bajo diseño masr- de  $T_j$  (parámetro conocido asociado a la variable auxiliar  $j$ -ésima). En principio suponemos que  $b_j$  es una constante por determinar. El estimador  $\hat{\sigma}_y^2$  es insesgado para la varianza poblacional  $\sigma_y^2$ , y su varianza es:



$$V(\hat{\sigma}_y^2) = V(s_y^2) - 2 \sum_{j=1}^k b_j \text{Cov}(s_y^2, t_j) + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_i b_j \text{Cov}(t_i, t_j).$$

Esta varianza se hace mínima cuando para  $j = 1, 2, \dots, k$ ,

$$b_j = \frac{\text{Cov}(s_y^2, t_j) - \sum_{i \neq j}^k b_i \text{Cov}(t_i, t_j)}{V(t_j)} = \frac{C_{yj} - \sum_{i \neq j}^k b_i C_{ij}}{C_{jj}}$$

o bien se hace mínima si y solo si para  $j = 1, 2, \dots, k$ ,

$$C_{yj} = \sum_{i=1}^k b_i C_{ij}$$

que constituye un sistema (digamos S) de  $k$  ecuaciones lineales con  $k$  incógnitas:  $b_1, b_2, \dots, b_k$ . Estas  $b_j$  son mínimas, pues la matriz Hessiana cuyo término  $ij$  es

$$\frac{\partial^2 V(\hat{\sigma}_y^2)}{\partial b_i \partial b_j} = 2C_{ij},$$

es la matriz de covarianzas (por 2), que es simétrica, y definida o semidefinida positiva (Tucker, 1973, p. 164, ejercicio 7; Cuadras, 1991). Por ello  $V(\hat{\sigma}_y^2)$  es una función convexa en  $(b_1, b_2, \dots, b_k) \in \mathbb{R}^k$ . El sistema S no puede resolverse directamente en la práctica pues  $C_{yj}$  son covarianzas desconocidas. No obstante, los valores de  $b_j$  pueden estimarse por  $\hat{b}_j$  mediante el método de los momentos, es decir, para  $j = 1, 2, \dots, k$

$$c_{yj} = \sum_{i=1}^k \hat{b}_i C_{ij}$$

donde  $c_{yj}$  es el estimador muestral por el método de los momentos del parámetro poblacional  $C_{yj}$ . Los valores mínimos de  $b_i$  permiten estimar insesgadamente la varianza poblacional y resultan ser tales que al sustituirse verifican

$$V(\hat{\sigma}_y^2) = V(s_y^2) - \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_i b_j C_{ij} \leq V(s_y^2),$$

para  $b_i$  fijos y mínimos, pues la matriz  $(C_{ij})$  es semidefinida positiva.

Al variar  $k$  y  $t_i$  se obtienen las distintas clases de estimadores de la varianza poblacional. Algunos trabajos adicionales relacionados con la estimación de la varianza poblacional para poblaciones finitas, están recogidos en las referencias.

### 3. Algunas cuestiones relacionadas

La recta de regresión de  $v = \hat{V}(\bar{y}) = \frac{s_y^2}{n}$  sobre la media muestral  $y = \bar{y}$ , admite la expresión



$$v = \frac{\sigma_y^2}{n} + \frac{\mu_3}{n\sigma_y^2} (y - \bar{Y})$$

donde  $\mu_3$  es el momento central de orden 3 en la población finita para la variable de interés. Esto se deduce de que

$$\text{Cov} \left( \bar{y}, \frac{s_y^2}{n} \right) = \frac{\mu_3}{n^2}$$

a partir de Cramér (1953, p. 401). De aquí deducimos que  $\mu_3/(n\sigma_y^2)$  es el incremento al que tiende la estimación  $\hat{V}(\bar{y})$ , cuando  $\bar{y}$  crece una unidad. Notemos que  $\mu_3$  puede ser no nulo cuando la población finita no es simétrica. Por tanto,  $\bar{y}$  y  $\hat{V}(\bar{y})$  son dos variables dependientes en el muestreo de poblaciones finitas con diseño masr, pues como señala Cramér (1953) la media y varianzas muestrales son independientes si y solo si la población es normal, cosa imposible para una población finita.

### Referencias

- [1] Chaudhuri, A. (1978). On estimating the variance of a finite population. *Metrika* **25**, 65-76.
- [2] Cramér, H. (1953). *Métodos Matemáticos de Estadística*. Aguilar. Madrid.
- [3] Cuadras, C. (1991). *Métodos de Análisis Multivariante*. PPU. Barcelona.
- [4] Ghosh, M. y Meeden, G. (1983). Estimation of the variance in finite population sampling. *Sankhyā B* **45**, 362-375.
- [5] Isaki, C.T. (1983). Variance estimation using auxiliary information. *J. Amer. Statist. Assoc.* **78**, 117-123.
- [6] Liu, T.P. (1974). A general unbiased estimator for the variance of a finite population. *Sankhyā* **36**, 23-32.
- [7] Prasad, B. y Singh, H.P. (1992). Unbiased estimators of finite population variance using auxiliary information in sample surveys. *Comm. Statist. Theory Methods* **21**, 1367-1376.
- [8] Rueda, M., Ruiz, M. y Arcos, A. (1994). À propos de l'estimation de la variance d'une population par le quotient. *XXVIème Journées de Statistique*, 542-544. Presses Académiques. Neuchâtel.
- [9] Singh, R.K. (1983). Estimation of finite population variance using ratio and product methods of estimation. *Biometrical J.* **25**, 193-200.
- [10] Strauss, I. (1982). On the admissibility of estimators for the finite population variance. *Metrika* **29**, 195-202.
- [11] Tucker, H.G. (1973). *Introducción a la Teoría Matemática de las Probabilidades y a la Estadística*. Vicens-Vives. Barcelona.



## CORRECCION DE ORBITAS DE ESTRELLAS DOBLES VISUALES

R. Cid y C. Longás

Departamento de Física Teórica

Facultad de Ciencias

Universidad de Zaragoza

### Abstract

In this article, we compare the results obtained by the application of several methods to the correction of orbits of visual binary stars, with the purpose of to verifying which of these methods are the best for each type of orbit.

In the comparison we employed the Comstock method, the modified Thiele method and the method designed by R. Cid and C. Longás, using Fourier series. These processes are applied to simulated orbits with the purpose of obtaining the previous orbit in each case.

### 1. Introducción

Cuando se calcula la órbita de una estrella doble visual con el número necesario y suficiente de datos, se obtienen resultados diferentes, según los lugares normales elegidos. Por esto, si se parte de una órbita previa, con resultados no aceptables, habrá que recurrir a su corrección.

De hecho existen varios métodos de corrección de órbitas que pueden ser aplicados para minimizar las diferencias (O-C) (observación-cálculo); pero ordinariamente, en todos ellos se aplica el siguiente esquema de cálculo:

Sea  $f = f(q_k, t)$  una función que coincide con cualquiera de las coordenadas observables, esto es, los ángulos de posición  $\theta$  y las distancias  $\rho$ , y que depende del tiempo  $t$  y de un conjunto de parámetros  $q_k$  ( $k = 1, 2, \dots, 7$ ).

Si se conocen valores previos  $q_k^0$  de dichos parámetros y se aplica el método de mínimos cuadrados, el problema de ajuste consiste en encontrar incrementos  $\Delta q_k$ , que sumados a los valores previos, hagan mínima la suma de cuadrados de las diferencias (O-C), es decir

$$\sum_{i=1}^m \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^m [f_i(q_k, t) - f_i^0]^2, \quad (1)$$

siendo  $m$  el número de observaciones.

Suponiendo que la función  $f(q_k, t)$  cumple las condiciones analíticas necesarias para que pueda ser desarrollada en serie de Taylor, en torno a los valores previos  $q_k^0$ , tendremos

$$f(q_k, t) = f(q_k^0, t) + \sum_{k=1}^7 \frac{\partial f}{\partial q_k} \Delta q_k + \dots \quad (2)$$



En el caso de utilizar el criterio de mínimos cuadrados, se llega a un sistema de ecuaciones normales de Gauss, que tiene el mismo número ( $k = 7$ ) de ecuaciones y de incógnitas  $\Delta q_k$ . Dicho sistema tiene asociada una matriz simétrica de coeficientes que simplifica notablemente los cálculos.

## 2. Métodos de corrección de órbitas

Describiremos brevemente los cálculos que requieren los métodos de Comstock, de Thiele modificado y de Cid-Longás utilizando series de Fourier, que serán aplicados en este trabajo

### 2.1 Método de Comstock

En este método, las ecuaciones a tratar por mínimos cuadrados, en función de los elementos orbitales previos ( $a_o, e_o, T_o, n_o, \Omega_o, \omega_o, I_o$ ), esto es (semieje mayor, excentricidad, época de paso por el periastro, movimiento medio, ángulo del nodo, argumento del periastro e inclinación), son, para cada observación de *ángulos de posición* y *distancias* ( $\theta_i, \rho_i$ ), las siguientes:

$$A\Delta\Omega + B\Delta I + C\Delta e + Hn\Delta T + K\Delta n = \Delta\theta_i$$

$$\alpha\Delta a + \beta\Delta I + \gamma\Delta e + \eta n\Delta T + \kappa\Delta n = \frac{1}{\rho_i}\Delta\rho_i$$

donde los coeficientes vienen dados por las igualdades:

$$\begin{aligned} A &= 1 & \alpha &= \frac{1}{a} \\ B &= -\frac{1}{2}\sin 2(\theta_i - \Omega)\tan I & \beta &= B\tan(\theta_i - \Omega) \\ C &= \frac{\sin 2(\theta_i - \Omega)}{\sin 2(\omega + f_i)} & \gamma &= C\tan(\theta_i - \Omega) - \tan(\omega + f_i) \\ D &= C\left(\frac{1}{1-e^2} + \frac{a}{r}\right)\sin f_i & \delta &= \gamma\left(\frac{1}{1-e^2} + \frac{a}{r}\right)\sin f_i - \frac{a}{r}\cos f_i \\ H &= -\frac{ab}{\rho^2}\cos I & \eta &= -\frac{ab}{\rho^2}\left(\gamma + \frac{ae}{b}\sin E_i\right) \\ K &= -H(t_i - T) & \kappa &= -\eta(t_i - T) \end{aligned} \quad (3)$$

siendo ( $f_i, E_i$ ) las anomalías verdadera y excéntrica correspondientes a la época  $t_i$ .

### 2.2 Método de Thiele modificado

En este método, se utilizan solamente diferencias  $\Delta\theta_i$  en ángulos de posición, por considerar que las observaciones en distancias presentan mayores errores.

Para explicar su fundamento, comencemos definiendo unos elementos orbitales previos ( $e_o, T_o, n_o, \Omega_o, \omega_o, I_o$ ), a partir de los cuales calculemos las constantes de Innes escritas en



la forma:

$$\begin{aligned} A &= (\cos \Omega_o \cos \omega_o - \sin \Omega_o \sin \omega_o \cos I_o), \\ B &= (\sin \Omega_o \cos \omega_o + \cos \Omega_o \sin \omega_o \cos I_o), \\ F &= -(\cos \Omega_o \sin \omega_o + \sin \Omega_o \cos \omega_o \cos I_o), \\ G &= -(\sin \Omega_o \sin \omega_o - \cos \Omega_o \cos \omega_o \cos I_o), \end{aligned} \quad (4)$$

así como los cocientes

$$b_o = \frac{B}{A}, \quad f_o = \frac{F}{A}, \quad g_o = \frac{G}{A}.$$

Entonces, si para un instante dado  $t_i$ , consideramos los valores

$$X_i = \cos E_i - e_o, \quad Y_i = \sqrt{1 - e_o^2} \sin E_i,$$

que corresponden a un movimiento elíptico, tendremos

$$\tan \theta_i = \frac{b_o X_i + g_o Y_i}{X_i + f_o Y_i}.$$

En estas condiciones, si ponemos  $\kappa_i = \frac{\rho_i}{a_o}$ , el problema de la corrección de órbitas se reduce a tratar por mínimos cuadrados la relación

$$\kappa_i \Delta \theta_i = A[(X_i \Delta b_o + Y_i \Delta g_o) \cos \theta_i - Y_i \Delta f \sin \theta_i] - \frac{\cos I}{\kappa_i} (P_i \Delta e + Q_i n_o \Delta T + R_i \Delta n), \quad (5)$$

que nos proporcionará los incrementos  $(\Delta b, \Delta f, \Delta g, \Delta e, \Delta T, \Delta n)$ , en función de los coeficientes

$$P_i = -Y_i \left[ 1 + \frac{X_i^2 + Y_i^2}{N(1 - e_o^2)} \right], \quad Q_i = \frac{Y_i^2 + X_i(1 - e_o^2)(X_i + e_o)}{N_i \sqrt{1 - e - o^2}},$$

$$R_i = -Q_i(t_i - T_o), \quad \text{siendo} \quad N_i = 1 - e_o^2 - e_o X_i$$

Una vez obtenidos los incrementos mencionados, tendremos inmediatamente los nuevos valores  $e = e_o + \Delta e$ ,  $T = T_o + \Delta T$  y  $n = n_o + \Delta n$ , así como  $b = b_o + \Delta b$ ,  $f = f_o + \Delta f$ , y  $g = g_o + \Delta g$ , deduciendo los elementos orbitales  $(\Delta \Omega, \Delta \omega, \Delta I)$ , por medio de las conocidas relaciones

$$\tan(\omega + \Omega) = \frac{b - f}{1 + g}, \quad \tan(\omega - \Omega) = -\frac{b + f}{1 - g}$$

y

$$\tan^2 \frac{I}{2} = \frac{1 - g \cos(\omega + \Omega)}{1 + g \cos(\omega - \Omega)}.$$

Como en este método de corrección no intervienen las distancias, para calcular el semieje mayor  $a$ , podemos proceder del siguiente modo: Calculemos unas distancias  $(\rho_i)_c$  con  $a = 1$  y comparemoslas, por cociente, con las distancias observadas  $(\rho_i)_o$ . Entonces, podremos determinar el semieje mayor  $a$ , por medio de la igualdad

$$a = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \frac{(\rho_i)_o}{(\rho_i)_c}.$$



### 2.3 Método de R. Cid y C. Longás

En este método, que utiliza solamente diferencias (O-C) en ángulos de posición, se aplica la fórmula (R. Cid y C. Longás, Rev. Acad. de Ciencias de Zaragoza, Serie 2, 47, pag. 132)

$$\Delta\theta_i = \Delta\theta_o + \sum_k \left[ \frac{\Delta a_k}{k} (1 - \cos kM_i) + \frac{\Delta b_k}{k} \sin kM_i \right] + \frac{\sqrt{1 - e_o^2} \cos I_o}{\kappa_i^2} \left( \frac{M_i \Delta n}{n_o} - n_o \Delta T \right) \quad (6)$$

donde para cada  $t_i$ ,  $M_i$  representa la anomalía media correspondiente,  $\kappa_i = \frac{\rho_i}{a_o}$ , y  $(\theta_o)_c$  el ángulo de posición correspondiente a la anomalía media  $M_c = 0$ .

El tratamiento de la ecuación anterior por mínimos cuadrados, nos permitirá calcular los incrementos  $\Delta\theta_o$ ,  $\Delta n$  y  $\Delta T$ , así como los incrementos  $\Delta a_k$ ,  $\Delta b_k$ , de los distintos coeficientes de la serie de Fourier.

Siguiendo con este proceso, y poniendo  $e_o = \cos \phi$ , se tiene

$$\Delta e = -\frac{1}{2\sqrt{1 - e_o^2}} \left[ (\phi - e_o \cos \phi) \frac{\Delta n}{n_o} - n_o \Delta T \right]$$

Finalmente para calcular los incrementos  $\Delta\Omega$ ,  $\Delta\omega$  y  $\Delta I$ , podemos utilizar la relación

$$\Delta\Omega + R_i \Delta\omega - S_i \Delta I = \Delta\theta_i \quad (7)$$

que deberá ser tratada por mínimos cuadrados y donde los coeficientes  $R_i$ ,  $S_i$ , vienen dados por las igualdades

$$R_i = \frac{\cos^2(\theta_i - \Omega_o) \cos I_o}{\cos^2(\omega_o + f_i)} \quad S_i = \tan(\omega_o + f_i) \sin I_o \cos^2(\theta_i - \Omega_o)$$

La corrección del semieje mayor  $a$ , deberá efectuarse del modo descrito en el método de Thiele.

Observemos, que en la aplicación de todos estos métodos, el proceso es iterativo, de manera que un primer resultado puede servir de base a un nuevo proceso. La iteración se proseguirá hasta que las diferencias (O-C) se consideren aceptables.

### 3. Aplicaciones numéricas

En nuestro estudio, la corrección por los métodos mencionados, ha sido aplicada a una órbita simulada, que consta de 60 épocas  $t_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 60$ ), tomadas aleatoriamente, y donde se supone que todas las observaciones utilizadas tienen el mismo peso.

En esta órbita, que denominamos *exacta*, hemos elegido un conjunto de elementos orbitales, con los que hemos calculado efemérides en ángulos de posición y distancias. A cada una de estas efemérides se le ha sumado un número aleatorio, con una distribución de Gauss, de media 0 y de varianza conocida, de manera que el conjunto de valores así obtenidos determinan lo que denominamos *órbita observada* del par visual.

Los métodos de corrección citados, se han implementado por medio de programas desarrollados en FORTRAN 77, que fueron diseñados y utilizados en nuestra Tesis doctoral



(C. Longás, 1993), y modificados posteriormente para el tratamiento de órbitas simuladas. En todos ellos figura la subrutina Gauss, de inversión de matrices.

En resumen, nuestro esquema de cálculos consiste en partir de una *órbita exacta*, a la que hemos asociado una *órbita observada*. En estas condiciones, hemos elegido unos elementos orbitales *previos* o *iniciales* ( $e_o, T_o, n_o, \Omega_o, \omega_o, I_o$ ), con ayuda de los cuales hemos calculado las diferencias ( $\Delta\theta_i, \Delta\rho_i$ ). Aplicando a estos resultados un método de corrección, hemos obtenido los incrementos ( $\Delta a, \Delta e, \Delta T, \Delta n, \Delta\Omega, \Delta\omega, \Delta I$ ), correspondientes a una primera iteración. Los valores así obtenidos ( $a = a_o + \Delta a, e = e_o + \Delta e, T = T_o + \Delta T, n = n_o + \Delta n, \Omega = \Omega_o + \Delta\Omega, \omega = \omega_o + \Delta\omega, I = I_o + \Delta I$ ), pueden ser considerados como elementos orbitales previos para una nueva iteración, continuando de este modo hasta obtener un resultado aceptable.

En concreto, nuestro estudio ha sido aplicado a una órbita simulada, de excentricidad no muy elevada y de movimiento retrógrado, cuyos elementos orbitales (exactos), entre los que se ha incluido el periodo  $P$ , en lugar del movimiento medio  $n$ , son los siguientes:

$$P = 63^a.050, \quad T = 1932.560, \quad a = 1''.800, \quad e = 0.580$$

$$\Omega = 215^\circ.600, \quad \omega = 145^\circ.300, \quad I = 125^\circ.400.$$

A dicha órbita le hemos asociado, como órbita supuestamente observada, *observaciones* de ángulos y distancias, preparadas con desviaciones típicas de  $1^\circ$  y  $0''.1$ , respectivamente. Esto significa que el 95.45% de las observaciones tienen un error menor que  $4^\circ$  y  $0''.4$  segundos de arco, respectivamente.

Asimismo, hemos elegido dos versiones de elementos orbitales previos, que incluimos como Caso A y Caso B, aplicándoles posteriormente los métodos de corrección de Comstock, de Thiele modificado y de Cid-Longás. En las aplicaciones se han efectuado seis iteraciones en el método de Comstock ("Coms6") y cuatro en el de Thiele modificado ("Thiel4"). En el método de Cid-Longás por medio de series de Fourier, se han utilizado tres versiones distintas, según el número de coeficientes ( $\Delta a_k, \Delta b_k$ ) considerados. Así, en el método de corrección, denotado como "F2", se han utilizado dos coeficientes  $\Delta a_k$  y dos coeficientes  $\Delta b_k$ , en tanto que en el método, denominado "F3", han sido tres de cada uno de ellos. Finalmente, en el método "F25" hemos tomado coeficientes promedio ( $\Delta a_o, \Delta b_o$ ) de 25 coeficientes ( $\Delta a_k, \Delta b_k$ ).

Dado que la convergencia de los métodos de corrección de Comstock y Thiele es más rápida que la obtenida para las distintas opciones por series de Fourier, es natural que se hayan empleado en éstas un mayor número de iteraciones, ordinariamente ocho, aunque en algunas ocasiones se ha llegado hasta 25.

#### 4. Dos ejemplos de corrección de órbitas

En ambos casos el cálculo se ha efectuado con  $\sigma_\theta = 1.0$  y  $\sigma_\rho = 0.1$ .

##### 4.1 Caso A

Una vez elegida la órbita previa, que tiene un error medio de  $12^\circ$  y una desviación típica en ángulos de  $12^\circ$ , y aplicados los distintos métodos de corrección, se ha obtenido la tabla



Ia, que se incluye a continuación:

Tabla Ia.- Elementos orbitales

	$P$	$T$	$a$	$e$	$\Omega$	$\omega$	$I$
Exacta	63.050	1932.560	1".800	0.580	215°.600	145°.300	125°.400
Previa	61.790	1933.965	1".730	0.604	219°.038	141°.289	120°.243
Thiel4	62.023	1932.544	1".799	0.581	215°.155	144°.919	125°.491
Coms6	63.279	1932.517	1".787	0.587	215°.136	144°.787	125°.735
Four-2	63.035	1932.423	1".810	0.588	213°.810	142°.638	125°.400
Four-3	63.050	1932.560	1".800	0.580	215°.600	145°.300	125°.480
Four25	63.012	1932.411	1".814	0.589	213°.706	142°.430	124°.805

En la tabla IIa, se han consignado: a) las sumas de cuadrados  $\sum(\Delta\theta)^2$  y  $\sum(\Delta\rho)^2$ , que resultan ser, respectivamente, 320 veces y 7 veces mayores en la órbita previa que en la exacta, b) los promedios  $\overline{\Delta\theta}$  y  $\overline{\Delta\rho}$  y c) las desviaciones típicas  $\sigma(\Delta\theta)$ ,  $\sigma(\Delta\rho)$ .

Tabla IIa.- Diferencias con las observaciones

	$\sum(\Delta\theta)^2$	$\sum(\Delta\rho)^2$	$\overline{\Delta\theta}$	$\sigma\Delta\theta$	$\overline{\Delta\rho}$	$\sigma\Delta\rho$
Exacta	5.75480E1	6.17900E-1	-1.61980E-1	9.65865E-1	6.08188E-3	1.01298E-1
Previa	1.86255E4	4.33026E0	-1.27962E1	1.21113E1	1.38737E-1	2.30050E-1
Thiel4	5.54959E1	6.25258E-1	-2.17384E-4	9.57070E-1	7.74921E-3	1.01789E-1
Coms6	8.36048E1	5.93257E-1	-1.22305E-4	1.18043E0	7.77605E-3	9.91321E-2
Four-2	7.26240E1	6.65154E-1	-2.60610E-2	1.09987E0	7.51799E-3	1.05021E-1
Four-3	7.42369E1	6.69809E-1	-5.26874E-2	1.11108E0	7.38549E-3	1.05334E-1
Four25	8.17135E1	7.09373E-1	2.25256E-1	1.14506E0	7.23115E-3	1.08672E-1

Tabla IIIa.- Diferencias con la órbita exacta

	$\sigma(\Delta\theta)$	$\sigma(\Delta\rho)$
Thiel4	1.301490E-1	2.740280E-3
Coms6	7.068544E-1	1.286939E-2
Four-2	6.225533E-1	1.647837E-2
Four-3	6.457744E-1	1.719644E-2
Four25	7.017192E-1	2.533614E-2

La tabla IIIa contiene las desviaciones típicas de las diferencias O-C entre las efemérides obtenidas en cada método y las efemérides obtenidas con la órbita exacta.



#### 4.2 Caso B

Con idéntico criterio se ha elegido una segunda órbita previa, cuyas tablas figuran a continuación:

Tabla Ia.- Elementos orbitales

	<i>P</i>	<i>T</i>	<i>a</i>	<i>e</i>	$\Omega$	$\omega$	<i>I</i>
Exacta	63.050	1932.560	1".800	0.580	215°.600	145°.300	125°.400
Previa	64.250	1931.510	1".690	0.567	212°.735	148°.222	123°.108
Thiel4	62.023	1932.544	1".799	0.581	215°.155	144°.919	125°.491
Coms6	63.279	1932.517	1".787	0.587	215°.136	144°.787	125°.735
Four-2	63.022	1932.645	1".803	0.577	215°.515	145°.264	125°.275
Four-3	63.044	1932.643	1".789	0.577	216°.044	146°.473	125°.971
Four25	63.044	1932.638	1".790	0.577	215°.993	146°.368	125°.879

Tabla IIa.- Diferencias con las observaciones

	$\Sigma(\Delta\theta)^2$	$\Sigma(\Delta\rho)^2$	$\overline{\Delta\theta}$	$\sigma\Delta\theta$	$\overline{\Delta\rho}$	$\sigma\Delta\rho$
Exacta	5.75480E1	6.17900E-1	-1.61980E-1	9.65865E-1	6.08188E-3	1.01298E-1
Previa	1.13118E4	1.96865E0	1.08572E1	8.40541E0	1.27772E-1	1.28394E-1
Thiel4	5.49585E1	6.25258E-1	-2.01453E-4	9.57066E-1	7.74895E-3	1.01789E-1
Coms6	8.36053E1	5.93258E-1	9.40283E-5	1.18043E0	7.77600E-3	9.91321E-2
Four-2	9.62114E1	6.46602E-1	-5.27016E-1	1.15142E0	8.05750E-3	1.03498E-1
Four-3	6.32634E1	6.10243E-1	-4.29329E-2	1.02594E0	8.06098E-3	1.00527E-1
Four25	6.29181E1	6.11481E-1	-5.83471E-2	1.02237E0	8.05110E-3	1.00631E-1

Tabla IIIa.- Diferencias con la órbita exacta

	$\sigma(\Delta\theta)$	$\sigma(\Delta\rho)$
Thiel4	1.301453E-1	2.740076E-3
Coms6	7.068607E-1	1.286939E-2
Four-2	6.019721E-1	8.723500E-3
Four-3	3.167834E-1	8.007020E-3
Four25	3.053665E-1	7.160012E-3

Como se comprueba en las tablas precedentes, esta órbita resulta ser algo mejor que la anterior, puesto que la suma de cuadrados de las diferencias O-C es, en ángulos, 200 veces mayor que en la exacta, teniendo un error medio de 10° y una desviación típica de 8°. Los resultados obtenidos coinciden exactamente con los de la órbita anterior en los



casos de Comstock y Thiele modificado. En los casos Four-2, Four-3 y Four25, se obtienen mejores resultados en los elementos  $\Omega$ ,  $\omega$ ,  $I$ .

## 5. Bibliografía

1. Cid, R. (1950): Contribución al estudio de estrellas dobles visuales. Tesis. Rev. de Geofísica, n 35 y n 36. Madrid.
2. Cid, R. (1952): Urania n 232. Tarragona.
3. Cid, R. (1960): Rev. Acad. de Ciencias de Zaragoza. 15, s 2, 37-49.
4. Cid, R. (1979): Discurso Académico. Rev. Acad. de Ciencias de Zaragoza. pags. 1-26.
5. Cid, R. (1989): Rev. Acad. de Ciencias de Zaragoza. 44, s 2, 71-88.
6. Cid, R. y Osacar, C (1990): Rev. Acad. de Ciencias de Zaragoza. 45, s 2, 95-110.
7. Cid, R. y Longás (1992): Rev. Acad. de Ciencias de Zaragoza. 47, s 2, 129-135.
8. Cid, R. y Longás (1993): Rev. Acad. de Ciencias de Zaragoza. 48, s 2, 117-134.
9. Comstock, G.C. (1918): A. J. 31, 33. USA.
10. Innes, R.T.A. y Van den Bos, W.H. (1926): Union Obs. Cir. 68, 354.
11. Innes, R.T.A. y Van den Bos, W.H. (1932): Union Obs. Cir. 86, 261.
12. Liso, M. (1962): Método de cálculo y mejora de órbitas de binarias visuales. Tesis. Rev. Acad. de Ciencias de Zaragoza. 16, s 2, 57-100.
13. Longás, C. (1993): Cálculo y corrección de órbitas de estrellas dobles visuales. Tesis. Facultad de Ciencias de Zaragoza.
14. Osacar, C. (1989): Estudio del movimiento de sistemas estelares. Tesis. Facultad de Ciencias de Zaragoza.
15. Thiele, T.N. (1860): A. N. 52, 39.
16. Thiele, T.N. (1883): A. N. 104, 245.



## De la observación al movimiento estelar. Aplicación al cálculo del ápex del Cúmulo Abierto en Coma Berenices.

Carlos Abad y Jurgen Stock

### Abstract

A particular form of getting proper motions from direct photographic exposures is given. The planification of observations and the reduction of plates using overlap-techniques and the correction of systematic errors between catalogues are also discussed. A new fitting function for digitised images is used to improve the measurement of the centroid's rectangular coordinates of saturated images in a plate. These techniques have been used to derive new proper motions for the Coma Berenices Cluster. Also, a discussion on apex determination is given.

### 1. Introducción

Un cúmulo estelar se puede definir como un conjunto de estrellas formadas, a partir de una misma nube, en un intervalo de tiempo relativamente corto. Las estrellas del cúmulo comparten, a grandes rasgos, sus movimientos, conservando su estructura a través del tiempo.

La Astrometría calcula los movimientos estelares a partir de observaciones de la posición de las estrellas. La desproporción entre el periodo de tiempo en el que se poseen observaciones y la escala temporal de los movimientos, hace que, para la mayoría de las estrellas sea prácticamente imposible detectar movimientos que contengan aceleraciones. Por ello, en lo que sigue, nos limitaremos a la proyección sobre la esfera celeste de la parte lineal del movimiento de la estrella, es decir, a su *movimiento propio*.

El movimiento propio de una estrella se obtiene ajustando una recta al conjunto de observaciones de la estrella realizadas en diferentes épocas. La pendiente de dicha recta indica la variación de la posición de la estrella con respecto al tiempo. Este ajuste se realiza por separado para cada una de las coordenadas que definen la posición de la estrella. La precisión del movimiento propio obtenido depende de la calidad de las observaciones, de el intervalo de tiempo que abarcan dichas observaciones y por último de la reducción de todas ellas a un mismo sistema de referencia, carente de errores sistemáticos.



El movimiento lineal y paralelo de dos estrellas en el espacio se traduce, al restringirnos a la geometría impuesta por la esfera celeste, en un movimiento sobre dos círculos máximos que se cortarán en dos puntos diametralmente opuestos. El concepto de corte cambia al de convergencia cuando, como en un cúmulo, el número de estrellas que comparten el movimiento lineal y paralelo es mayor que dos. Este punto hacia el cual parece que las estrellas se mueven, pero que nunca alcanzarán, se denomina *ápex*.

Una vez calculado, el *ápex* nos permite conocer la componente radial del movimiento del cúmulo y por tanto su movimiento lineal espacial. Como consecuencia, con ayuda de observaciones espectroscópicas, se puede determinar, con probabilidad muy alta, la pertenencia de las estrellas al cúmulo.

El estudio de cúmulos cercanos es básico para conocer las relaciones existentes entre parámetros tan importantes como magnitud, color y tipo espectral de las estrellas. El conocimiento de los miembros de un cúmulo y de sus características, contribuye al conocimiento de la estructura y dinámica de nuestra galaxia y a un mejor conocimiento de la evolución estelar, además pueden ser usados como patrones de distancia.

El cúmulo estelar abierto en Coma Berenices es un cúmulo similar a la mayoría de los cúmulos estelares catalogados, pobre en número de estrellas, pero que por su proximidad al Sistema Solar se presenta como angularmente extenso, abarcando en el cielo un campo de unos 10 grados de diámetro [26]. Esta característica, unida a que los movimientos de las estrellas que componen el cúmulo son pequeños y no destacan del resto de aquellos de las estrellas que aparecen en el mismo campo, hace del cálculo del *ápex* un tema delicado astrométricamente hablando. El cálculo de movimientos propios debe ser muy preciso y obtenido obligatoriamente a través de la unión de posiciones absolutas obtenidas para las distintas épocas de observación.

El trabajo que en este artículo se resume, eminentemente astrométrico, estudia los pasos a seguir para que, partiendo de unas observaciones a realizar, de otras ya realizadas y de unos catálogos ya elaborados, se obtengan movimientos propios precisos que nos lleven a un mejor conocimiento de los cúmulos estelares.

El cúmulo estelar abierto en Coma Berenices ha servido de excusa para tratar y mejorar la determinación de posiciones a través de placas fotográficas, y una vez calculados los movimientos propios de las estrellas del campo, para tratar también la búsqueda de asociaciones estelares.

## 2. Reducción de placas fotográficas

Reducir una placa fotográfica consiste en determinar las coordenadas astronómicas  $(\alpha_i, \delta_i)$ , de los astros que aparecen en la misma, a partir de las coordenadas  $(x_i, y_i)$  obtenidas en



un sistema rectangular definido sobre la placa.

La determinación de las coordenadas se realiza de una forma relativa, ya que éstas se obtienen a partir de las posiciones de estrellas ya catalogadas cuyas imágenes han podido ser identificadas sobre la placa.

Cuando la reducción se realiza en forma individual, es decir, para una sola placa, las estrellas de referencia tienen la misión de trasladar el sistema de referencia del catálogo a la placa, además de dar la formulación que nos permite pasar de coordenadas cartesianas  $(x_i, y_i)$  a esféricas  $(\alpha_i, \delta_i)$ .

Podemos dividir en dos grupos los modelos matemáticos que realizan una reducción. El primero, que podríamos llamar clásico, trabaja en el plano y calcula la posición que ocuparían las imágenes de las estrellas de referencia en la placa a través de una proyección que es función de la distancia focal y el tipo de telescopio utilizado en la observación. Las coordenadas obtenidas por observación se hacen coincidir con las obtenidas por medio de un desarrollo en serie

$$\begin{aligned} x' &= \sum_{j+i=1}^{n_1} b_{ij} x^i y^j + \sum_{k=1}^{l_1} \sum_{j+i=1}^{n_2} d_{ij} m^k x^i y^j + \sum_{k=1}^{l_3} \sum_{j+i=1}^{n_3} e_{ij} c^k x^i y^j \\ y' &= \sum_{j+i=1}^{n_1} g_{ij} x^i y^j + \sum_{k=1}^{l_1} \sum_{j+i=1}^{n_2} h_{ij} m^k x^i y^j + \sum_{k=1}^{l_3} \sum_{j+i=1}^{n_3} p_{ij} c^k x^i y^j \end{aligned}$$

función de éstas y donde pueden aparecer otros parámetros como  $m, c$ , relacionados con la magnitud y el color de las estrellas.

En la mayoría de los casos se conocen los términos que serán significativos, incluso se puede calcular una buena aproximación de sus valores. Los términos lineales van a ser los encargados de buscar la coincidencia en orientación y escala de ambos sistemas, mientras que el resto de los términos de mayor orden van a representar las deformaciones. Cuando nos referimos a éstos últimos y hacemos hincapié en el tipo de proyección utilizada estamos hablando de distorsión.

Un segundo grupo está basado en la búsqueda de una solución espacial en lugar de plana. A este grupo pertenece el método de reducción de Stock [22]. Dicho método parte también de una proyección dependiente de un factor de escala y del telescopio utilizado en la observación, pero traslada a la esfera unidad los puntos  $(x_i, y_i)$  que representan las imágenes de la placa. Es allí donde relaciona las coordenadas  $(\alpha_i, \delta_i)$  de la estrella de referencia, dadas por el catálogo, y expresadas en forma cartesiana como  $(\xi_{i1}, \xi_{i2}, \xi_{i3})$  con las  $(x_i, y_i)$  en su forma proyectada  $(u_{i1}, u_{i2}, u_{i3})$ . Dicha relación se obtiene por la composición de dos rotaciones elementales y viene definida por tanto por una matriz  $A$  teóricamente ortogonal. Un esquema representativo del método puede ser el siguiente:

$$(\alpha_i, \delta_i) \xrightarrow{\text{transformación}} (\xi_{i1}, \xi_{i2}, \xi_{i3}) \xleftrightarrow{\text{Giro } A} (u_{i1}, u_{i2}, u_{i3}) \xleftarrow{\text{proyección}} (x_i, y_i)$$



donde el sistema de ecuaciones a resolver viene dado por la expresión

$$\xi_{ik} = \sum_{j=1}^3 a_{kj} u_{ij} \quad (k = 1, 2, 3), \quad (1)$$

siendo  $a_{kj}$  los elementos de la matriz de giro  $A$ .

### 3. Técnica de traslapo

No siempre es posible encontrar el número suficiente de estrellas de referencia o de catálogo que permitan realizar la reducción de una placa determinando los parámetros significativos del desarrollo y que influyen en la posición final de las estrellas.

Existe una técnica que consiste en programar la observación, de forma que, el área del cielo a estudiar sea cubierta por varias placas cuyos campos se superponen o traslapan. Con dicha técnica se consigue que cada estrella tenga imágenes en más de una placa o exposición. A las estrellas que tienen más de una imagen las llamaremos *de traslapo*. Si se ha realizado la observación según esta técnica, es posible encontrar una solución en forma conjunta a las placas, sin más que tener en cuenta que *imágenes que provienen de una misma estrella deben dar posiciones idénticas en el cielo* [15].

En el método de Stock [22], las estrellas de traslapo producen un nuevo tipo de ecuaciones (2), que se suman a las formadas por las estrellas de referencia (1).

$$\sum_{j=1}^3 a_{ij}^{(n)} u_{lj}^{(n)} = \sum_{j=1}^3 a_{ij}^{(m)} u_{kj}^{(m)} \quad (k = 1, 2, 3), \quad (2)$$

donde  $a_{ij}^{(n)}$  y  $a_{ij}^{(m)}$  representan las matrices solución a las placas  $n$  y  $m$  respectivamente, donde se encuentran las imágenes comunes de coordenadas  $u_{lj}^{(n)}$  para la imagen  $l$  de la placa  $n$  y  $u_{kj}^{(m)}$  para la imagen  $k$  de la placa  $m$ .

El número de ecuaciones de condición formadas a partir de las estrellas de traslapo es, en general, mucho mayor que el de las ecuaciones formadas a partir de las ecuaciones de referencia, pudiéndose decir que las estrellas de traslapo van a dar la rigidez al entrelazamiento de unas placas con otras, mientras que, las de catálogo van a aportar el sistema de referencia al conjunto.

El mismo número de estrellas de referencia que antes era necesario para la obtención de la solución de una placa, lo es ahora para el conjunto. De tal forma que, si para la reducción, en forma individual, de  $N$  placas que se traslapan eran necesarias  $3N$  estrellas de referencia, al hacerlo en forma conjunta, el número se reduce a 3.

Este hecho es muy importante por su aplicación a los actuales detectores como el CCD. Debido a su pequeño tamaño, es imposible, en la mayoría de los casos, encontrar un número mínimo de estrellas de referencia que hagan posible asemejar una exposición tomada con CCD a una exposición fotográfica y tratarla como tal [4].



Taff [24] desarrolla una variante de traslape que se puede aplicar en la reducción de una sola placa. Aplica el modelo de reducción en forma idéntica a áreas diferentes de la placa que se traslapan. De ésta forma estudia la falta de acoplamiento del modelo según el área o, lo que es igual, las deformaciones de la placa respecto al modelo.

La idea original del trabajo que aquí se resume, era la introducción en las ecuaciones (1) y (2) de los términos que representan la distorsión cuando se usa el método de Stock [22] en su forma de reducción en bloque, pero finalmente derivó en un tema más general y completo, donde se da una solución al problema de la distorsión cuando se manejan placas que se traslapan, empleando cualquier tipo de reducción en su forma más sencilla.

La siguiente tabla da una relación de los catálogos que se han reunido, haciendo mención a sus épocas medias, y a si han sido reducidos el trabajo mencionado

Catálogo	poca media	Reducción
AC Zona París	1894	si
AC Zona Oxford	1903	si
BOSS	1900	-
HECKMANN	1926	si
YALE	1926	-
AGK2	1930	-
NIRS	1950	-
POSS	1953	si
AGK3	1960	-
CARLSBERG	1987	-
C. SCHMIDT (CIDA)	1988	si
C. SCHMIDT (CIDA)	1990	si
C. SCHMIDT (CIDA)	1994	si

La unificación de los diferentes catálogos en un mismo sistema para el cálculo de movimientos propios, exige la elección de ese sistema. El sistema *Hipparcos* hubiera sido el ideal para ello, pero a falta de su disposición, dos son los candidatos: el sistema definido por el catálogo Carlsberg y el definido por el catálogo PPM. La elección del primero respecto al segundo se debe a las siguientes razones:

- en la actualidad, la densidad en número de estrellas para la zona estudiada es semejante a la del PPM,
- el error en posición es menor para el catálogo Carlsberg,
- llega a magnitudes superiores,



- su época media es similar a la de las últimas épocas de observación tomadas con la Cámara Schmidt, telescopio no especialmente astrométrico y donde los problemas de reducción son más variados. A veces estos problemas son de origen desconocido y de magnitud importante.

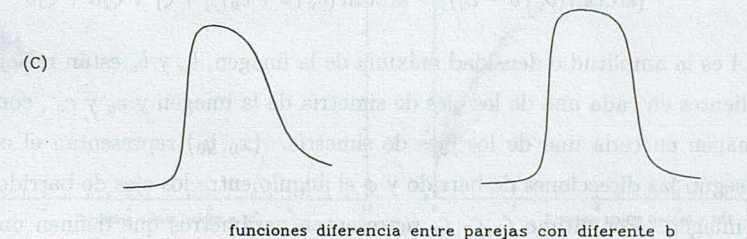
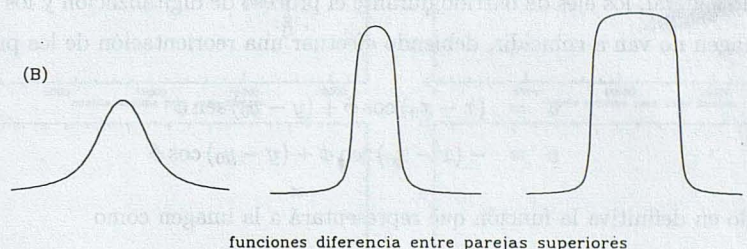
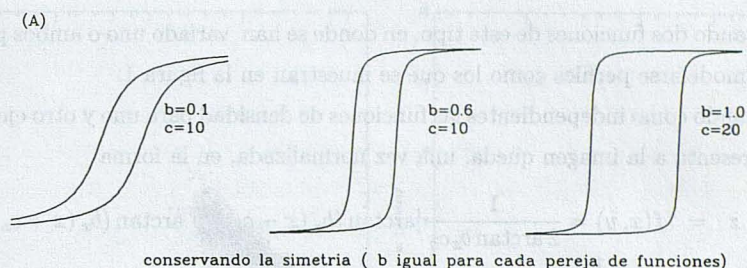
Existen dos formas de corregir los errores sistemáticos entre catálogos. La primera consiste en estudiar la parte sistemática de las diferencias en posición para estrellas comunes, llevadas a una misma época. La segunda consiste en reducir uno de ellos respecto al otro. Como ya se ha indicado anteriormente, en la reducción de placas, las estrellas de referencia tienen como misión el trasladar su sistema, por ello, y para comprobar, para cualquier tipo de telescopio, todas las técnicas novedosas que aquí se ensayan, se han vuelto a reducir aquellos catálogos para los cuales se disponía de las placas (POSS -Palomar Observatory Sky Survey) o de las posiciones de sus imágenes medidas  $(x, y)$  (AC -Astrographic Catalogue). Para ello se ha usado el catálogo Carlsberg como catálogo de referencia.

#### 4. Determinación de posiciones sobre la placa

Las imágenes que producen las estrellas sobre una placa, pueden considerarse como manchas extensas que, en condiciones óptimas, deben poseer simetría radial, con un máximo de densidad en el centro.

Una vez definido un sistema cartesiano sobre la placa, ésta puede medirse sustituyendo unívocamente las imágenes por puntos que las van a representar. Dichos puntos van a ser los centros aparentes de simetría de las imágenes, cuando el operador es quien decide en forma visual el punto, o el máximo de la distribución de densidades asociadas a los píxeles, o elementos de área, para los procesos digitalizados. En esta última forma, la función de densidad que se suele elegir es la gaussiana, que, aunque no reproduce en la mayoría de los casos la función verdadera, sí da, y en una forma bastante sencilla, el máximo de la distribución. El principal problema se presenta para imágenes saturadas que, en general, serán imágenes correspondientes a estrellas de referencia y por tanto muy importantes para el proceso de reducción. En ellas, el valor de densidad asociado a los píxeles centrales, fluctúa levemente alrededor de un valor constante, y la función gaussiana pierde sentido ante posibles deformaciones de la imagen, provenientes de la observación, y que serían mas obvias en su parte externa. La solución en dicho caso se encuentra, asignando mayor peso a los píxeles que encierran la parte externa de la imagen que a los internos.





**Figure 1.**—Formación de perfiles a través de una resta de dos funciones arcotangentes. Con las funciones que representan la parte (A) de la figura, se pueden crear perfiles simétricos, parte (B), o asimétricos, parte (C), semejantes a los que se pueden encontrar en una sección transversal de una imagen fotográfica. Basta para ello, variar los parámetros que definen la anchura ( $c$ ) y la inclinación ( $b$ ) de cada una de las funciones arcotangentes que definirán la imagen.



En el trabajo se desarrolla una nueva función, dependiente de la función arco tangente a la que se le han agregado 2 parámetros que permiten manejar el desplazamiento y la inclinación de la misma

$$d = \arctan [b(x - c)] \quad (3)$$

Restando dos funciones de este tipo, en donde se han variado uno o ambos parámetros, pueden modelarse perfiles como los que se muestran en la figura 1.

Tomando como independientes las funciones de densidad para uno y otro eje, la función que representa a la imagen queda, una vez normalizada, en la forma

$$z = f(x, y) = \frac{1}{2 \arctan b_x c_x} [\arctan (b_x (x - c_x)) - \arctan (b_x (x + c_x))] \quad (4)$$

$$\frac{1}{2 \arctan b_y c_y} [\arctan (b_y (y - c_y)) - \arctan (b_y (y + c_y))]$$

Por lo general, los ejes de barrido durante el proceso de digitalización y los de simetría de la imagen no van a coincidir, debiendo efectuar una reorientación de los primeros

$$\begin{aligned} u &= (x - x_0) \cos \phi + (y - y_0) \sin \phi \\ v &= -(x - x_0) \sin \phi + (y - y_0) \cos \phi \end{aligned} \quad (5)$$

quedando en definitiva la función que representará a la imagen como

$$f(u, v) = \frac{A}{4 \arctan b_u c_u \arctan b_v c_v} [\arctan (b_u (u - c_u)) - \arctan (b_u (u + c_u))] \quad (6)$$

$$[\arctan (b_v (v - c_v)) - \arctan (b_v (v + c_v))] + \zeta_1 + \zeta_2 u + \zeta_3 v$$

donde:  $A$  es la amplitud o densidad máxima de la imagen,  $b_u$  y  $b_v$  están relacionadas con las pendientes en cada uno de los ejes de simetría de la imagen y  $c_u$  y  $c_v$ , con el tamaño de la imagen en cada uno de los ejes de simetría.  $(x_0, y_0)$  representan el centro de la imagen según las direcciones de barrido y  $\phi$  el ángulo entre los ejes de barrido y simetría para la imagen. Por último  $\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3$  representan parámetros que definen un plano que representará el nivel del fondo del cielo.

Para la determinación de los parámetros que definen la función (6), el modelo debe ser aplicados a las imágenes a través de un proceso de ajuste por mínimos cuadrados. La falta de linealidad obliga a la búsqueda de la solución en una forma iterativa, partiendo de valores iniciales que deben ser lo suficientemente buenos como para conseguir su convergencia.

Suponemos simetría en la imagen y por ello los parámetros iniciales definidos para uno de los ejes, lo serán también para el otro. Cuando no existen problemas de saturación sobre la placa, el parámetro *densidad o cuenta máxima* tiene una relación muy bien definida respecto a los parámetros *inclinación y anchura de la imagen*. Pero, según se puede



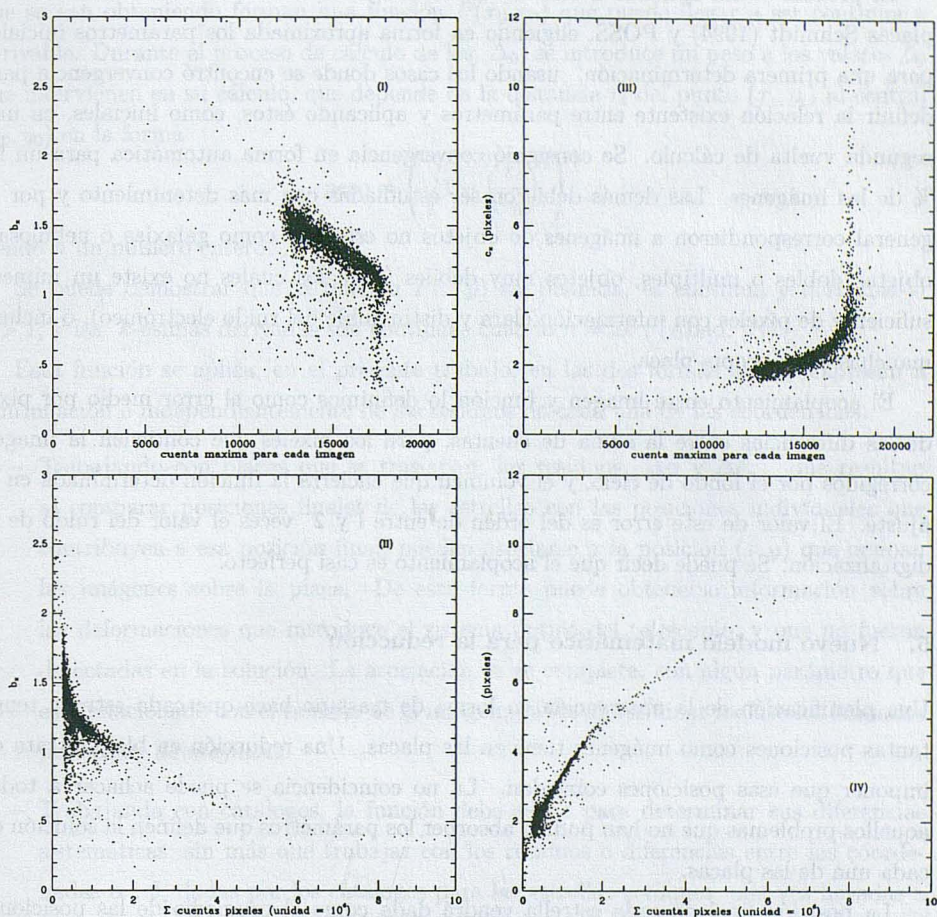


Figure 2.—Se muestra la relación existente entre dos de los parámetros que conforman la función de ajuste a una imagen fotográfica y los parámetros cuenta máxima de los píxeles que contienen la imagen y suma de cuentas para esos mismos píxeles. La finalidad es apreciar que, ante la saturación, el parámetro suma de cuentas es un mejor calibrador del resto de los parámetros que el parámetro cuenta máxima que permanece acotado a partir de un cierto valor. El gráfico está basado en el ajuste de imágenes pertenecientes a una de las placas del catálogo POSS.



apreciar en la figura (2), el parámetro *volumen o suma total de cuentas para píxeles que encierra la imagen* parece el más adecuado, ya que esta relación se mantiene, incluso en los casos de saturación.

El proceso se ha aplicado a más de 40000 imágenes, correspondientes a la serie de placas Schmidt (1994) y POSS, eligiendo en forma aproximada los parámetros iniciales para una primera determinación, usando los casos donde se encontró convergencia para definir la relación existente entre parámetros y aplicando éstos, como iniciales, en una segunda vuelta de cálculo. Se consiguió convergencia en forma automática para un 90 % de las imágenes. Las demás debieron ser estudiadas con más detenimiento y por lo general correspondieron a imágenes de objetos no estelares como galaxias o nebulosas, objetos dobles o múltiples, objetos muy débiles (para los cuales no existe un número suficiente de píxeles con información clara y distinguible del ruido electrónico), o incluso manchas en la propia placa.

El acoplamiento entre imagen y función lo definimos como el error medio por pixel de las diferencias entre la suma de cuentas, para los píxeles que contienen la imagen corregidos por el fondo de cielo, y el volumen que encierra la función determinada en el ajuste. El valor de este error es del orden de entre 1 y 2 veces el valor del ruido de la digitalización. Se puede decir que el acoplamiento es casi perfecto.

## 5. Nuevo modelo matemático para la reducción

Una planificación de la observación en forma de traslapo hace que cada estrella tenga tantas posiciones como imágenes tiene en las placas. Una reducción en bloque trata de imponer que esas posiciones coincidan. La no coincidencia se puede achacar a todos aquellos problemas que no han podido absorber los parámetros que definen la solución de cada una de las placas.

La posición final de cada estrella vendrá dada como el promedio de las posiciones individuales obtenidas, para esa estrella, en las placas donde tenía imagen. Aparece con ello un residuo asociado a cada una de las posiciones individuales. Se trata de descubrir la información que contienen dichos residuos, y en especial extraer de ellos la parte sistemática, si la hay. Para ello se hace uso de una función ya definida por Stock y Abad [23]. Dicha función está definida en forma discreta tal como se describe a continuación.

Sea un conjunto de puntos  $(x_i, y_i)$  sobre el plano, que llevan asociados cada uno un valor real  $\Delta_i$ . El valor asociado  $\Delta_0$  a un punto cualquiera  $(x_0, y_0)$  lo vamos a determinar a través de los valores asociados  $\Delta_i$  a los puntos  $(x_i, y_i)$  pertenecientes a un entorno, con centro en el punto  $(x_0, y_0)$ , de radio  $r_0$  fijado previamente, y que mantendremos constante durante todo el proceso. El valor  $\Delta_0 = Q(x_0, y_0)$  se obtiene a partir de una sencilla



función polinómica  $Q(x, y)$ , que se ajusta a los puntos iniciales  $(x_i, y_i)$ . Para un nuevo punto  $(x_0, y_0)$ , su valor  $\Delta_0$  se obtiene trasladando el entorno de radio  $r_0$  usando este punto como nuevo centro, y realizando de nuevo el ajuste de la función  $Q(x, y)$  a los  $\Delta_i$  iniciales que han quedado dentro del nuevo entorno. De esta forma, los valores  $\Delta_0$  que se van obteniendo forman una función  $P(x_0, y_0)$  que puede llegar a ser continua y derivable. Durante el proceso de cálculo de los  $\Delta_0$  se introduce un peso a los valores  $\Delta_i$  que intervienen en su cálculo, que depende de la distancia  $r_i$  del punto  $(x_i, y_i)$  al central  $(x_0, y_0)$  en la forma

$$peso = \left( \sqrt{1 - \left( \frac{r_i}{r_0} \right)^2} \right)^n$$

siendo  $n$  un número entero.

Se puede demostrar que la función  $P(x, y)$  así definida, es continua y derivable si  $n > 1$ , y las  $k$ -ésimas derivadas son continuas cuando  $n = 2k$ , (Abad, [1]).

Esta función se aplica, en el presente trabajo, en las dos formas que se expresan a continuación e independientemente de los residuos de cada una de las coordenadas.

- Trabajando con placas que se traslapan, los residuos  $\Delta\alpha$  y  $\Delta\delta$ , que resultan al comparar posiciones finales de las estrellas con las posiciones individuales que contribuyen a esa posición final, pueden asociarse a la posición  $(x, y)$  que ocupan las imágenes sobre la placa. De esta forma puede obtenerse información sobre las deformaciones que introduce el sistema óptico del telescopio, y que no fueron detectadas en la solución. La asociación, si se completa, con algún parámetro que esté relacionado con el tamaño de la imagen, puede determinar incluso los llamados *problemas de magnitud*.
- Trabajando con catálogos, la función debe servir para determinar sus diferencias sistemáticas, sin más que trabajar con los residuos o diferencias entre las coordenadas  $\alpha$ ,  $\delta$ , dadas por los catálogos para las estrellas comunes, una vez llevadas a una misma época.

En ambos casos, una vez trabajados los residuos para cada una de las coordenadas por separado, podemos llegar a visualizar los resultados y hacer que estos sean de gran utilidad cuando, al definir una red sobre la superficie que contiene los puntos para los cuales hay residuos, se calculan los valores que corresponderían a los nodos de la red. Estos valores, se pueden mostrar en un gráfico como vectores asociados, cada uno a su nodo, de módulo la composición de los valores obtenidos para cada una de las coordenadas y orientación la que indiquen dichas componentes.

Esta visualización permite observar cuales van a ser las deformaciones que indican los residuos no absorbidas por la reducción o comparación de catálogos, según el caso,



permitiéndonos comprobar la complejidad de las mismas y ayudándonos en la decisión del cómo se van a eliminar. Si la estructura mostrada es fácil de representar por una función analítica, el proceso se limitará a sustituir las deformaciones puntuales por la función que las representa y aplicarla a los valores iniciales. Si por el contrario, la estructura es compleja, una red más densa en nodos puede ser utilizada para encontrar, por interpolación, el valor a aplicar individualmente a cada uno de los puntos a corregir.

## 6. Aplicación del modelo

### 6.1 a la reducción de placas fotográficas

El modelo descrito se ha aplicado a diferentes series de placas que provenían de diferentes telescopios, debiendo hacer especial mención a aquellas provenientes de telescopios tipo Cámara Schmidt. Dicho telescopio tiene la particularidad de que la superficie focal debe ser una sección esférica, de centro idéntico al de la superficie del espejo y la mitad del radio de curvatura del espejo. Para conseguir que todos los puntos de la placa estén en foco, la placa debe ser curvada hasta conseguir dicha curvatura o bien se debe utilizar un aplanador de campo que hace el papel de dicho doblamiento.

Esta manipulación de la placa hace que el telescopio no sea el idóneo para la calidad de los trabajos astrométricos, aunque sí es envidiable por su rapidez de respuesta y su campo ancho.

En las series de placas tomadas con la cámara Schmidt del CIDA, se detectaron problemas difíciles de determinar que pusieron a prueba la capacidad del método aquí desarrollado. Parte de los resultados obtenidos para diferentes telescopios ya fueron publicados en [2] y [3].

La serie realizada en 1988 es presentada como ejemplo de dichas dificultades. La figura (3) muestra una dependencia de la distorsión, en función de los puntos de contacto y presión del grupo de anillos, que el sistema de tensado de la placa de la propia cámara, disponía en ese momento. Parte de dicha deformación era encubierta, en una forma totalmente casual, por la simetría en la ubicación de los centros de las placas al planificar el traslape. Esto da pie a afirmar, que la mejor planificación de una observación con traslape, es aquella que, sin dejar zonas del cielo peor cubiertas que otras, tienen distribuidos los centros de las placas en forma aleatoria.

La aplicación del método a los problemas relacionados con el tamaño de la imagen (también llamados problemas de magnitud), se realiza agrupando las imágenes en intervalos no disjuntos del parámetro que represente al tamaño de la imagen. Dicho parámetro será: el diámetro de la imagen, la magnitud de la estrella, el volumen encerrado por la función de ajuste a la imagen una vez digitalizada, o cualquier otro que lo represente.



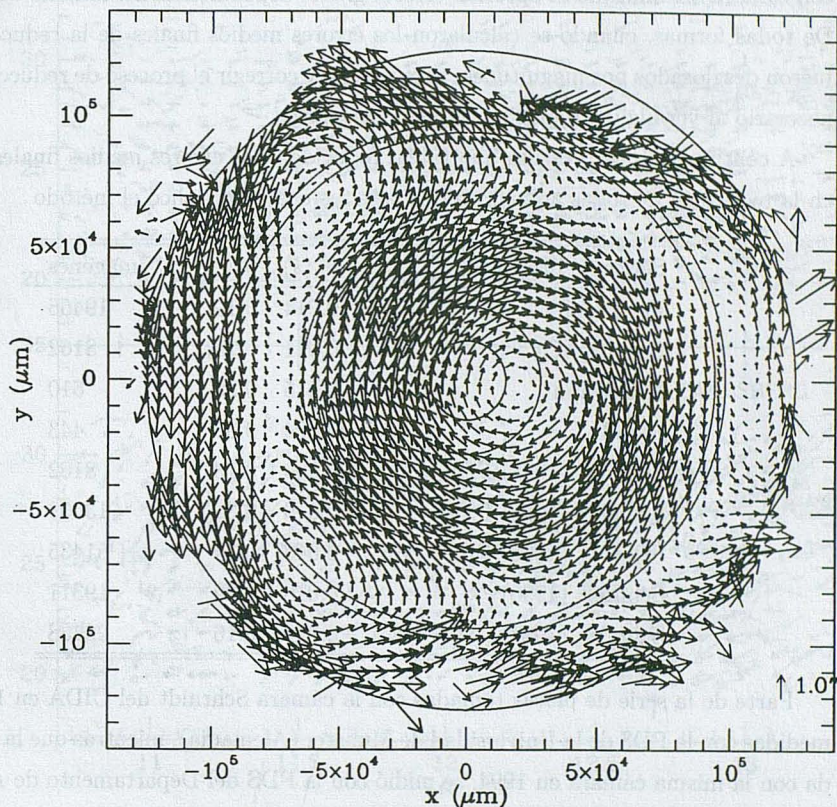


Figure 3.—Campo de distorsión calculado, a través de una solución lineal, combinando la comparación de posiciones individuales, obtenidas de la reducción, con las dadas por el catálogo Carlsberg (fuente externa), y con la posición promedio de posiciones para una misma estrella (fuente interna). Placas medidas con la PDS de Munster.



El parámetro más conveniente es el relacionado con el volumen ya que permite unificar criterios, en una forma más rigurosa, para placas o exposiciones diferentes. Una vez separados en intervalos, se aplica el método en forma similar a como se realiza para la distorsión.

En las series de placas reducidas, tanto del Catálogo Astrográfico, como las tomadas con cámara Schmidt, no se aprecian errores graves dependientes del tamaño de la imagen. De todas formas, cuando se calcularon los errores medios finales de la reducción, éstos, fueron desglosados por magnitudes, para repetir y corregir el proceso de reducción si fuera necesario al ver alguna dependencia *error-magnitud*.

A continuación se presenta una tabla, reducida a los errores medios finales obtenidos en la reducción de todas aquellas series para las cuales se aplicó el método

Series de placas	$\sigma_\alpha(s)$	$\sigma_\delta(^{\circ})$	n° imágenes
París (AC)	0.014	0.19	19466
Oxford(AC)	0.021	0.25	8162
Heckmann	0.015	0.26	610
POSS	0.024	0.30	443
Schmidt (1988) PDS	0.009	0.13	8162
Schmidt (1988) PSK2	0.019	0.30	13639
Schmidt (1988) PDS+PSK2	0.013	0.19	51435
Schmidt (1990)	0.018	0.29	19311
Schmidt (1994)	0.012	0.16	26738

Parte de la serie de placas tomadas con la cámara Schmidt del CIDA en 1988 fueron medidas con la PDS de la Universidad de Munster (Alemania), mientras que la serie tomada con la misma cámara en 1994, se midió con la PDS del Departamento de Astronomía de la Universidad de Yale (EEUU). Se puede apreciar la gran influencia, que ejerce una buena medición sobre los resultados finales.

## 6.2 a la unificación de catálogos ya elaborados

El modelo se aplicó a las diferencias en posición para estrellas comunes entre los catálogos ya elaborados y el catálogo Carlsberg (tomado como de referencia, para todo el trabajo), llevadas a la época del catálogo a corregir. Una muestra de cómo se presentan las correcciones a aplicar se ve en la figura 4, que representa las diferencias sistemáticas entre los catálogos AGK2 y AGK3 con el catálogo Carlsberg.



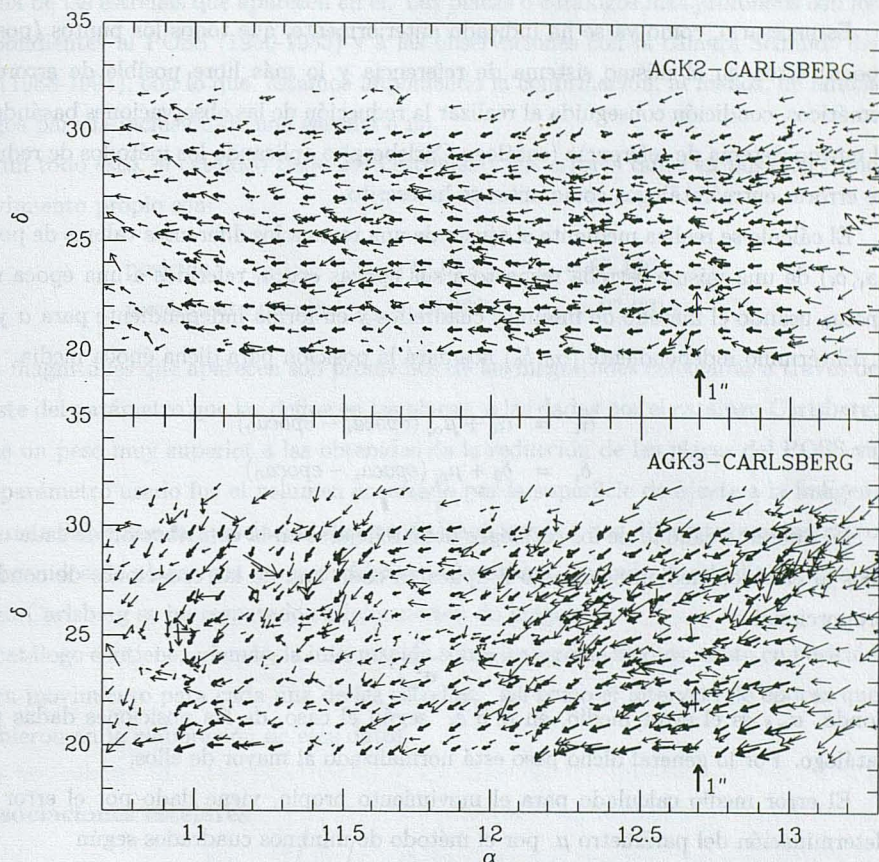


Figure 4.—Representación en forma de diagrama de flechas de los errores sistemáticos entre catálogos obtenidos a partir de las diferencias de posición para estrellas comunes, cuando están referidas a una misma época y equinoccio. Estas diferencias están expresadas bajo el diagrama y en trazo más suave. El catálogo fuente o de referencia es el catálogo Carlsberg para ambas partes del gráfico, correspondiendo el superior a las correcciones del catálogo AGK2, y el inferior al catálogo AGK3.



## 7. Catálogo y movimientos propios

El cálculo del movimiento propio de una estrella se reduce a la obtención de la proyección del movimiento rectilíneo y uniforme de esa estrella, para ello, se realiza el ajuste de una recta a la posición en  $\alpha$  o  $\delta$  respecto a la época.

Es necesario, como ya se ha indicado anteriormente, que todos los puntos (posición, época) estén en el mismo sistema de referencia y lo más libre posible de errores sistemáticos, condición conseguida al realizar la reducción de las observaciones basándose en el mismo sistema de referencia (catálogo Carlsberg) o aplicando los métodos de reducción de errores entre catálogos como antes se ha escrito.

El cálculo se realiza mediante el ajuste de una recta a los diferentes valores de posición ( $\alpha_i, \delta_i$ ) de una misma estrella respecto a sus épocas  $epoca_i$  referidas a una época media  $epoca_0$  usando el método de mínimos cuadrados y en forma independiente para  $\alpha$  y para  $\delta$ . El término independiente ( $\alpha_0, \delta_0$ ) nos dará la posición para dicha época media.

$$\alpha_i = \alpha_0 + \mu_{\alpha_i} (epoca_i - epoca_0)$$

$$\delta_i = \delta_0 + \mu_{\delta_i} (epoca_i - epoca_0)$$

La diferente calidad de los catálogos debe reflejarse en la contribución de cada uno de ellos al cálculo, mediante un peso a aplicar a cada una de las ecuaciones de condición, proporcional a

$$\frac{1}{\sigma_{\alpha,\delta}^2},$$

donde  $\sigma_{\alpha,\delta}$  es el error medio, en  $\alpha$  o  $\delta$ , según el caso, de las posiciones dadas por el catálogo. Por lo general dicho peso está normalizado al mayor de ellos,

El error medio calculado para el movimiento propio, viene dado por el error en la determinación del parámetro  $\mu$  por el método de mínimos cuadrados según

$$\epsilon_{\alpha,\delta} = \sqrt{\frac{\sum \sigma_{\alpha,\delta}^2 s(j,j)}{n-m}},$$

donde  $\sigma_{\alpha,\delta}$  son los errores medios en  $\alpha$  o  $\delta$  del ajuste,  $n$  el número de ecuaciones ( $\sum pesos_i$ ),  $m$  el número de incógnitas a calcular y  $s(j,j)$  el elemento de la diagonal correspondiente al parámetro  $\mu$  de la matriz inversa a la formada por las ecuaciones normales en el ajuste.

Para la formación del catálogo compilado definitivo es necesario el presentar las posiciones y los movimientos de las estrellas, refiriéndolos a un mismo sistema y a una cierta época para el caso de las posiciones. Dicha época puede ser una época común a todas las estrellas o, como en el presente caso, una época individual para cada una de ellas, definida como la época media de las que contribuyeron a la creación de esa posición. El cálculo



de la posición para la época media es simultáneo al del movimiento propio, al usar las ecuaciones de condición (7).

En la formación de nuestro catálogo para la zona imponemos la condición de la existencia de un intervalo mínimo de épocas de observación, superior a los 30 años, para cada una de las estrellas que aparecen en él. Las placas o catálogos más profundos son los correspondientes al POSS (1950-1955) y a las observaciones con la cámara Schmidt del CIDA (1988-1994), con lo que estamos imponiendo la confirmación, al menos, de ambos catálogos para la inclusión de una estrella o no.

Según todo esto, el catálogo tiene 2078 estrellas y sus errores tanto en posición como en movimiento propio son:

$$\begin{array}{ll} \text{posición:} & \epsilon_{\alpha} = 0''.012, \quad \epsilon_{\delta} = 0''.166, \\ \text{movimiento propio:} & \epsilon_{\mu_{\alpha}} = 0''.0007, \quad \epsilon_{\mu_{\delta}} = 0''.001. \end{array}$$

Las magnitudes que aparecen son promedios de las magnitudes calculadas a través de un ajuste del parámetro que las define en las placas, a las dadas por el catálogo Carlsberg, dándole un peso muy superior a las obtenidas de la reducción de las placas del POSS ya que el parámetro usado fue el volumen encerrado por la superficie de ajuste a la imagen, mucho más fiable que la apreciación directa de los diámetros por diferentes operadores o a los obtenidos de placas con otros problemas adicionales. Cuando la estrella está en el catálogo Carlsberg se ha respetado su información de magnitud.

El catálogo contiene, además, la información sobre los errores medios, tanto en posición como en movimiento para cada una de las estrellas, así como el intervalo de épocas que intervinieron en la elaboración de esos datos.

## 8. Asociaciones estelares

Una asociación estelar se caracteriza, entre otras cosas, porque sus miembros conservan un movimiento espacial similar, y por tanto, su proyección sobre la esfera celeste, tiene características bien definidas.

Por un lado, los movimientos propios también serán similares entre ellos. Por otro lado, los movimientos espaciales se representarán como movimientos sobre círculos máximos al pasar a la esfera celeste, y por tanto, el paralelismo se transforma en convergencia. Al punto de convergencia, si puede determinarse, lo denominaremos *ápex* de la asociación.

Una simple representación sobre un plano de los movimientos propios del conjunto de las estrellas, donde los ejes coordenados  $Ox$ ,  $Oy$  representen los movimientos propios en  $\alpha$  y en  $\delta$  respectivamente, debe mostrarnos si existen agrupaciones de los mismos, o lo que es igual, si se destaca un grupo de estrellas del resto por su movimiento.



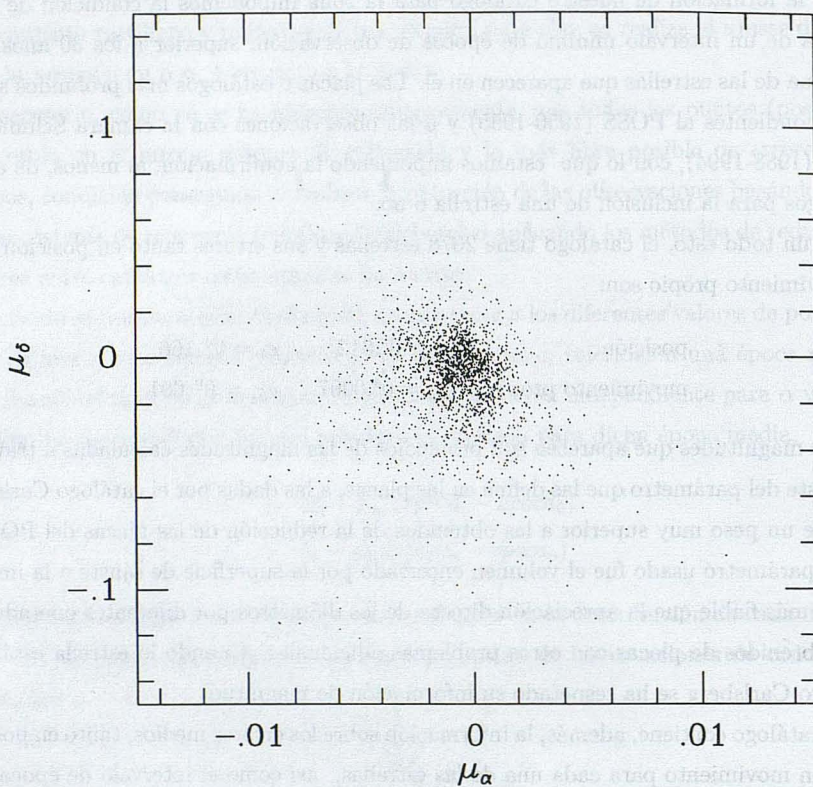


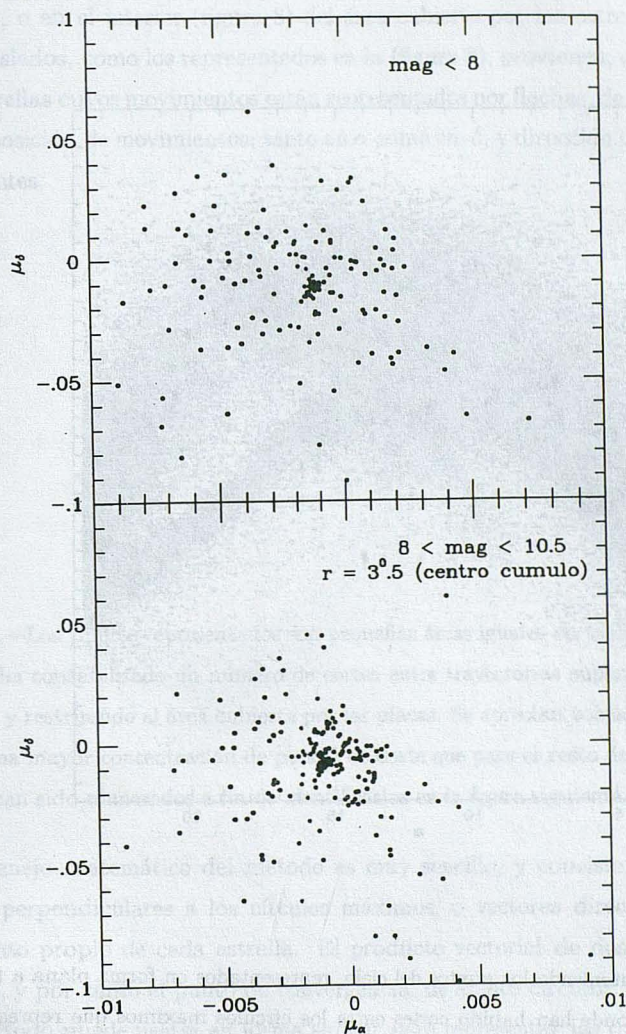
Figure 5.—Representación de los movimientos propios para todas las estrellas del área de Coma. No se muestra, de forma evidente, la ubicación del cúmulo en la figura, pero sí se ve un desplazamiento sistemático de todos ellos hacia el tercer cuadrante.

En el caso particular que se ha trabajado, da la coincidencia de que los miembros del cúmulo de Coma presentan movimientos muy pequeños, y similares al movimiento común de desplazamiento en el área (figura 5), pero, al ser ya conocida la existencia de dicho cúmulo, si restringimos el gráfico a las estrellas más brillantes, es posible confirmar dicha agrupación (figura 6).

Como se desprende de lo dicho anteriormente, no es siempre tan fácil el determinar posibles asociaciones, y más cuando nos vamos a magnitudes cada vez mayores, es decir, a estrellas más débiles.

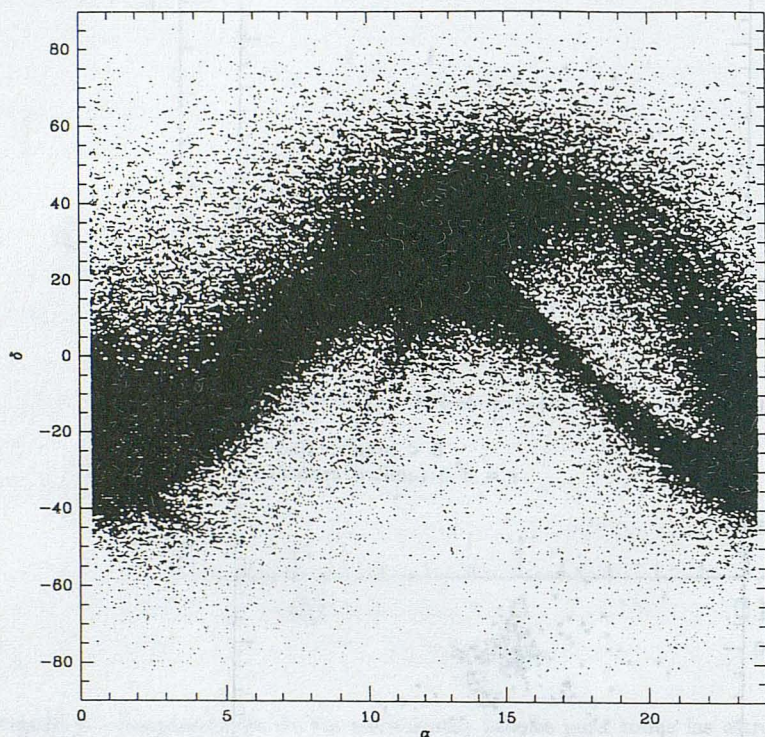
El método que aquí se expone, puede dar luz a esta búsqueda y está basado en la distribución sobre la esfera celeste de los puntos de corte de los círculos máximos que representan a los movimientos propios. Si existe una zona del cielo donde hay una mayor





**Figure 6.**—Cuando nos restringimos a las estrellas más brillantes del área, se puede apreciar que muchas de ellas tienen un movimiento común, lo que revela la existencia del cúmulo. En el panel superior se representan los movimientos propios para estrellas más brillantes que la magnitud 8, mientras que en el inferior y restringido a un área circular de  $3.5$  de radio, se representan los movimientos propios para estrellas con magnitudes comprendidas entre 8 y 10.5.





**Figure 7.**—Figura conteniendo los puntos del cielo, representados en forma plana a través del programa IRAF, en donde han habido cortes entre los círculos máximos que representan las trayectorias de las estrellas contenidas en el área de Coma en estudio. Se aprecian de manera clara dos direcciones de preferencia de corte, una perteneciente al desplazamiento general y sistemático existente en la zona y otra en la dirección del cúmulo de Coma que se está estudiando. Poniendo un límite inferior al número de cortes por punto o pequeña área de estudio, se pueden resaltar detalles del gráfico.



concentración de puntos de corte que en el resto, es porque hay un grupo de estrellas con movimientos, al menos en dirección, parecidos. Es allí donde debe comenzar la búsqueda.

El panorama puede ser diferente cuando examinamos la distribución en el exterior (figura 7), o en el interior (figura 8) del área cubierta por las estrellas que disponemos. Puntos aislados, como los representados en la (figura 8), provienen, como los de la (figura 9), de estrellas cuyos movimientos están representados por flechas, de módulo proporcional a la composición de movimientos, tanto en  $\alpha$  como en  $\delta$ , y dirección la indicada por dichas componentes.



**Figure 8.**—Los puntos representados son pequeñas áreas iguales en tamaño, a modo de píxeles donde se ha contabilizado un número de cortes entre trayectorias superior a un límite inferior arbitrario y restringido al área cubierta por las placas. Se aprecian zonas o puntos aislados, que indican una mayor concentración de puntos de corte que para el resto de puntos de su entorno. Algunos han sido numerados a fin de identificarlos en la figura siguiente.

El manejo matemático del método es muy sencillo, y consiste, en trabajar con los vectores perpendiculares a los círculos máximos, o vectores directores, que definen el movimiento propio de cada estrella. El producto vectorial de dos de ellos nos dará la dirección, y por tanto el punto de convergencia, de ambos círculos.

El método puede usarse en forma similar para representar las trayectorias de un conjunto de estrellas. Para ello basta trabajar con el vector direccional de cada círculo máximo representante del movimiento de cada una de las estrellas, y el vector direccional de un círculo máximo que, conteniendo el diámetro perpendicular al plano medio del movimiento común del cúmulo, va variando su orientación (figura 10). El ápex estará sobre el círculo máximo perpendicular a la trayectoria media del cúmulo donde sea mínima la dispersión de los puntos de intersección entre las trayectorias de las estrellas y cada uno de esos círculos perpendiculares a la trayectoria media. El ápex vendrá definido como el punto medio de todas esas intersecciones.



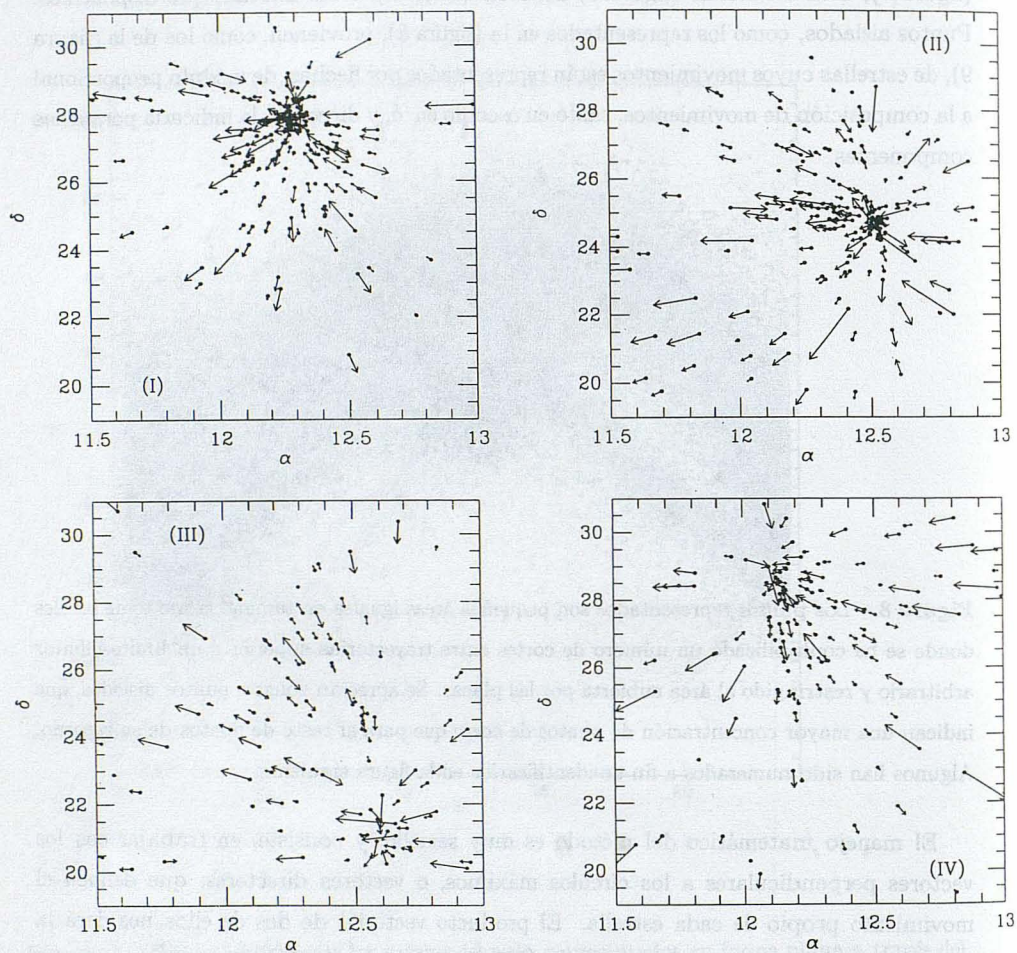


Figure 9.—Representación, en forma plana, de las estrellas y sus movimientos (como flechas proporcionales a ellos), que dieron lugar a la formación de alguno de los puntos que aparecen numerados en la figura 8. Se han eliminado todas aquellas estrellas cuyo número de cortes con el resto y en ese punto, es inferior al número de puntos de cortes promedio, que en ese punto tienen las estrellas que lo formaron. Los gráficos no indican agrupaciones físicas estelares, sino que pueden ser base de estudio para el encuentro, si lo hay, de dichas agrupaciones.



El método de los mínimos cuadrados, aplicado a los datos de la Tabla 10, permite visualizar las trayectorias seguidas por cada una de las estrellas según su movimiento propio. El gráfico representa dichas trayectorias, pasadas al plano, para estrellas miembros del cúmulo de Coma, donde se han señalado con trazos más fuertes, las trayectorias que corresponden a las estrellas más brillantes, a fin de comprobar la ausencia de dependencia de las mismas con la magnitud.

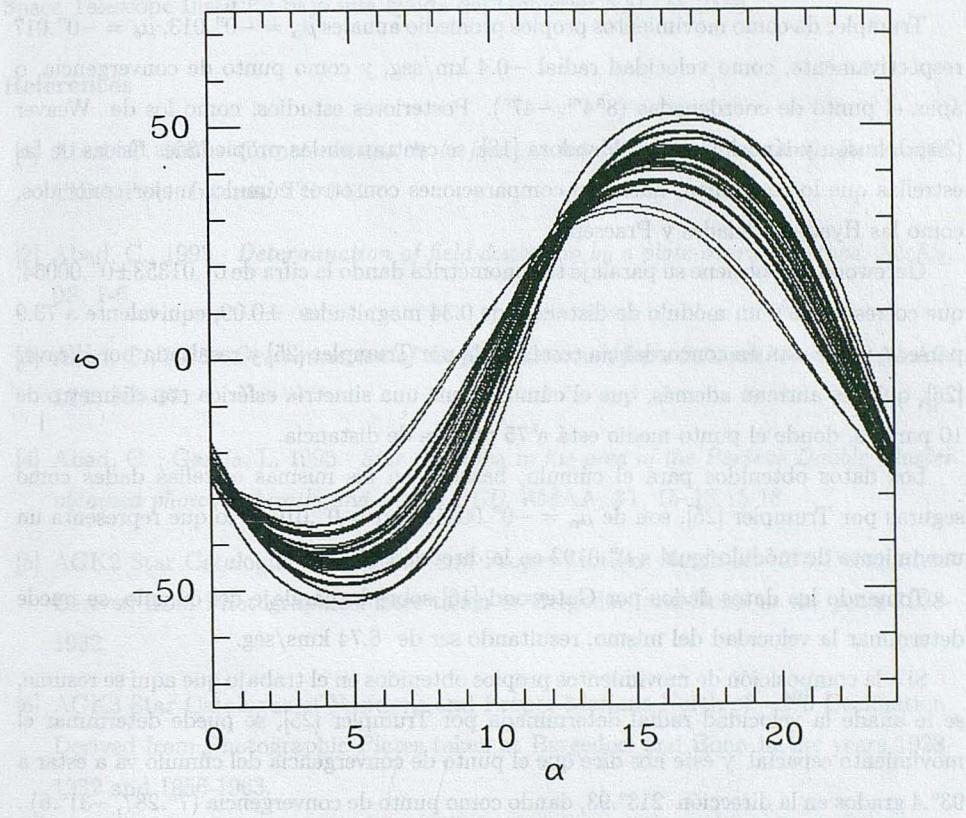


Figure 10.—El método, permite visualizar las trayectorias seguidas por cada una de las estrellas según su movimiento propio. El gráfico representa dichas trayectorias, pasadas al plano, para estrellas miembros del cúmulo de Coma, donde se han señalado con trazos más fuertes, las trayectorias que corresponden a las estrellas más brillantes, a fin de comprobar la ausencia de dependencia de las mismas con la magnitud.



## 9. Cúmulo de Coma. Movimiento y ápex.

El primer trabajo importante referente a dicho cúmulo se debe a Trumpler [25]. En dicho trabajo, Trumpler estudia la pertenencia o no de las estrellas de campo al cúmulo, determinando una lista de 37 estrellas que da como miembros seguros, a través de los criterios de movimiento propio, velocidad radial y estudio espectroscópico. Esta lista se ha mantenido prácticamente hasta nuestros días.

Trumpler da como movimientos propios promedio anuales  $\mu_\alpha = -0''.013$ ,  $\mu_\delta = -0''.017$  respectivamente, como velocidad radial  $-0.4$  km/seg, y como punto de convergencia, o ápex el punto de coordenadas ( $8^h 4^m$ ,  $-47^\circ$ ). Posteriores estudios, como los de Weaver [26], Johnson y Knuckles [17] y Mendoza [18], se centran en las propiedades físicas de las estrellas que lo componen, haciendo comparaciones con otros cúmulos mejor conocidos, como las Hyades, Pleiades y Praesepe.

Gatewood [16] obtiene su paralaje trigonométrica dando la cifra de  $0''.01353 \pm 0''.00054$ , que corresponde a un módulo de distancia de  $0.34$  magnitudes  $\pm 0.09$ , equivalente a  $73.9$  parsecs, y que está en concordancia con la dada por Trumpler [25] y resaltada por Weaver [26], quienes afirman además, que el cúmulo tiene una simetría esférica con diámetro de  $10$  parsecs, donde el punto medio está a  $75$  parsecs de distancia.

Los datos obtenidos para el cúmulo, basados en las mismas estrellas dadas como seguras por Trumpler [25], son de  $\mu_\alpha = -0''.00118$ ,  $\mu_\delta = 0''.0107$  lo que representa un movimiento de módulo igual a  $0''.0192$  en la dirección  $213^\circ.93$ .

Tomando los datos dados por Gatewood [16] sobre la paralaje del cúmulo, se puede determinar la velocidad del mismo, resultando ser de  $6.74$  kms/seg.

Si a la composición de movimientos propios obtenidos en el trabajo que aquí se resume, se le añade la velocidad radial determinada por Trumpler [25], se puede determinar el movimiento espacial y éste nos dice que el punto de convergencia del cúmulo va a estar a  $93^\circ.4$  grados en la dirección  $213^\circ.93$ , dando como punto de convergencia ( $7^h.287$ ,  $-31^\circ.6$ ). Ello nos indica que el movimiento del cúmulo es paralelo al nuestro ya que el apex está situado alrededor de los  $90^\circ$  y que la falta de convergencia, según muestra la figura 10, podría deberse a un pequeño movimiento de expansión del mismo.

## Agradecimientos

Al Dr. Rafael Cid Palacios por sus enseñanzas durante el período universitario, que condujeron a que la astronomía sea en la actualidad mi dedicación profesional, y al Dr. Alberto Abad Medina por su desinteresada colaboración, tanto durante la elaboración del trabajo original que dio origen a la presente publicación, como en la presentación de este



trabajo.

Los datos del POSS usados en el presente trabajo están basados en placas del National Geographic Society - Palomar Observatory Sky Survey (NGS-POSS) obtenidas usando el Telescopio Oschin de Monte Palomar. El NGS-POSS fue fundado con el aporte de la National Geographic Society al California Institute of Technology. Las placas fueron procesadas en forma digital con su permiso. El Digitalized Sky Survey fue realizado en el Space Telescope Institute bajo una ayuda del Gobierno NAC W-2166.

## References

- [1] Abad, C. 1987.- *Características de la función interpoladora, Polinomio Deslizante*. CIDA Publ. Interna, TH-143.
- [2] Abad, C., 1993.- *Determination of field distortion by a plate-overlap method*. A&AS, **98**, 1-6.
- [3] Abad, C., 1995.- *Determination of the field distortion for a Schmidt telescope*. A&AS, **111**, 369-371.
- [4] Abad, C. , García, L. 1995.- *Star positions in the area of the Perseus Double Cluster obtained photographically and with a CCD*. RMAA, **31**, 15-18
- [5] AGK2 Star Catalogue of Positions and Proper Motions North of  $-2^{\circ}5$  Declination. Derived from Photographic Plates taken at Bergedorf and Bonn in the years 1928-1932.
- [6] AGK3 Star Catalogue of Positions and Proper Motions North of  $-2^{\circ}5$  Declination. Derived from Photographic Plates taken at Bergedorf and Bonn in the years 1928-1932 and 1956-1963.
- [7] Astrographic Catalogue, Zona de Oxford I, Observaciones entre los  $25^{\circ}$  y los  $31^{\circ}$ , épocas de las observaciones comprendidas entre 1892 y 1904. Versión computarizada P. Corbin, U. S. Naval Observatory, Washington.
- [8] Astrographic Catalogue, Zona de París, Observaciones entre los  $18^{\circ}$  y los  $24^{\circ}$ , épocas de las observaciones comprendidas entre 1891 y 1906. Versión computarizada P. Corbin, U. S. Naval Observatory, Washington.
- [9] Boss, B. 1936: General Catalogue of 33342 Stars for the Epoch 1950. Vols III & IV. Carnegie Institution of Washington, Washington 1936.



- [10] Carlsberg Meridian Catalogue La Palma No.4. Observations of positions of stars and planets: May 1984 to February 1988.(CMC4), 1989. Copenhagen University Observatory, Royal Greenwich Observatory and Real Instituto y Observatorio de la Armada en San Fernando.
- [11] Carlsberg Meridian Catalogue La Palma No.5. Observations of positions of stars and planets: May 1988 to December 1989.(CMC5), 1991. Copenhagen University Observatory, Royal Greenwich Observatory and Real Instituto y Observatorio de la Armada en San Fernando.
- [12] Carlsberg Meridian Catalogue La Palma No.6. Observations of positions of stars and planets for the year 1990.(CMC6), 1992. Copenhagen University Observatory, Royal Greenwich Observatory and Real Instituto y Observatorio de la Armada en San Fernando.
- [13] Carlsberg Meridian Catalogue La Palma No.7. Observations of positions of stars and planets: January 1991 to August 1992.(CMC7), 1993. Copenhagen University Observatory, Royal Greenwich Observatory and Real Instituto y Observatorio de la Armada en San Fernando.
- [14] Carlsberg Meridian Catalogue La Palma No.8. Observations of positions of stars and planets: August 1992 to December 1993.(CMC8), 1993. Copenhagen University Observatory, Royal Greenwich Observatory and Real Instituto y Observatorio de la Armada en San Fernando.
- [15] Eichhorn, H. 1987.- *The development of the overlapping-plate method.* en Mapping the Sky, IUAU Symp. **133**, 177- eds. S. Dèbarbat, J.A. Eddy, H.K. Eichhorn, H. Y Upgran, A.R.
- [16] Gatewood, G. 1995.- *Map-based trigonometric parallaxes of open clusters: Coma.* Ap. J. **445**, 712-715.
- [17] Johnson, H.L., Knuckle, C.F., 1955.- *The Hyades and Coma Berenices star clusters.* Ap.J. **122**, 209.
- [18] Mendoza, E. 1963.- Bull. Obs. Tonantzintla y Tacubaya.
- [19] NIRS Catalogue. P. Corbin, Catálogo de Referencia producido de Observaciones con Círculo Meridiano y creado por el U. S. Naval Observatory Washington.
- [20] POSS, National Geographic Society and Palomar Observatory Sky Survey. California Institute of Technology. Pasadena, California (USA).



- [21] PPM Star Catalogue. Positions and Proper Motions of 181731 stars north of  $-2.5$  degrees declination for equinox and epoch J2000.0 comp. by S. Roser and U. Bastian. A. Publ. of the Astronomisches Rechen-Institute Heidelberg. 1991
- [22] Stock, J. 1981.- *Block adjustment in photographic astrometry*. R.M.A.A. **6**, 115-118.
- [23] Stock, J., Abad, C. 1988.- *The unification of astrometric catalogues*. RMAA, **16**, 63.
- [24] Taff, L.G. 1989.- *Schmidt plate astrometry*. AJ, **98**, 1912-1917.
- [25] Trumpler, R.J., 1938.- *The star cluster in Coma Berenices*. Lick Obs. Bull., **18**, 167.
- [26] Weaver, H. F. 1952.- *Spectral-type, magnitude, and color-index relations in the galactic star cluster in Coma Berenices*. Ap. J. **116**, 612.
- [27] Yale Catalogue. Transactions of the Astronomical Observatory of Yale University. Vol. 24. Revised Catalogue of 10358 stars, +25 to +30 by Ida Barney. New Haven. Published by the Observatory, 1953.
- [28] Yale Catalogue. Transactions of the Astronomical Observatory of Yale University. Vol. 25. Revised Catalogue of 8703 stars, +20 to +25 by Ida Barney. New Haven. Published by the Observatory, 1954.

## 1. Introduction

There are very few materials which are more complex, more difficult to cast into a definite physical and theoretical framework than the range of phenomena associated with fracture. And also, there are few problems with a wider range of fields of applications: material science engineering, rock mechanics and rock physics, earth tectonics and earthquake engineering. Mechanical failure of a sufficiently large sample of a heterogeneous material consists of a crack nucleation process, followed by the formation of an unstable crack and finally catastrophic failure. Traditional fracture mechanics explores the crack nucleation stage by postulating the existence of a crack and examining its subsequent growth. Fracture properties are determined by the presence of defects at the microscopic atomic scale: dislocations, vacancies, or a analysis of the nucleation of fracture is a problem in heterogeneous nucleation. As in most heterogeneous nucleation processes, significant insight is gained and configuration is compensated statistically across its fracture strength and other fracture properties. For this reason a statistical analysis is often necessary, and in fracture this analysis is usually based on the Weibull and other extreme value distributions.



## Stochastic models of fracture of the fiber-bundle type with stress dissipation

Javier B. Gómez<sup>(1)</sup>, David Íñiguez<sup>(2)</sup> y Amalio F. Pacheco<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> Departamento de Ciencias de la Tierra, Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain,

<sup>(2)</sup> Departamento de Física Teórica, Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain.

### Abstract

We reanalyse the several schemes of load transfer of the *fiber-bundle* type used in stochastic models of quasistatic fracture (i.e. the equal load-sharing, the local load-sharing, and the fractal load-sharing schemes), assuming that a fraction of the acting stress is lost in each transfer event. The inclusion of this dissipative effect can make these models, usually discussed in the restricted area of bundle strength and materials science, have a more clear projection in earth sciences, and more specifically in the mechanics of earthquakes.

### 1. Introduction

There are very few mechanical problems more complex, more difficult to cast into a definite physical and theoretical treatment than the range of phenomena associated with fracture. And also, there are few problems with a wider range of fields of applications: material science, engineering, rock mechanics and rock physics, seismology and earthquake occurrence. Mechanical failure of a sufficiently large sample of a *heterogeneous material* consists of a crack nucleation process, followed by the formation of an unstable crack and finally catastrophic failure. Traditional fracture mechanics bypasses the crack nucleation stage by postulating the existence of a crack and analysing its consequences. Since fracture properties are determined by the presence of *defects* at the microscopic -atomic- scale (impurities, dislocations, vacancies, etc.), analysis of the nucleation of fracture is a problem in heterogeneous nucleation. As in most heterogeneous nucleation processes, significant sample-to-sample and configuration-to-configuration variability occurs in fracture strength and other fracture properties. For this reason, a *statistical* analysis is often necessary, and in fracture this analysis is usually based on the Weibull and other extreme value distributions.



Our understanding of fracture processes in heterogeneous materials (i.e., composites, rocks, ceramics, textiles, wood, concrete, etc.) has improved recently with the development of simple algorithms to simulate these processes in quasistatic loading; most of these algorithms are based upon the framework of *percolation theory*, and include models of random resistor networks (Arcangelis *et al.*, 1985), spring networks (Feng and Sen, 1984; Kantor and Webman, 1984), and beam networks (Roux and Guyon, 1985). However, it is difficult to determine scaling and asymptotic properties with these models because the algorithms are quite slow and also because the asymptotic properties are weak, so that many decades in sample size are required for a definite analysis. A more important problem is that fracture depends on the properties of the *tails* of the failure distribution, in particular on the properties of the "high-reliability" tail of the failure distribution. Naturally it is difficult to sample the tails of the distribution using conventional Monte Carlo methods (all the models cited above are based ultimately on a Monte Carlo sampling of the failure space). It is thus very important to develop a set of simple models which can be analysed, either analytically or numerically, with precision and with clear asymptotic and scaling behaviours, in order to guide in the understanding of more complex models.

The load-transfer models that we review here belong to this group of simple, stochastic, quasistatic fracture models amenable to either closed analytical or fast numerical solution, and whose output, spanning many orders of magnitude in sample size, allows a precise characterization of their asymptotic behaviour. The collective name given to this type of models is *fiber-bundle models* or fiber-bundle paradigm, because they originated in close connection to the strength of bundles of textile fibers (Daniels, 1945). Since Daniels' seminal work, there has been a long tradition in the use of these simple models to analyse failure in heterogeneous materials. Some of the models are of mean-field type and ignore the stress enhancements near locally failed regions: these are the *equal load-sharing* (ELS) models (also known as "democratic" models, because the load supported by a failing element is shared "democratically", i.e., in equal parts, among all the surviving elements), and they are usually analytically solvable (see, for example, McCartney and Smith, 1983).

The case where the stress enhancements are taken into account has proven much more difficult, and with the exception of the early work by Harlow and Phoenix (1978a, b, 1981a, b) and Smith (1981), and a small number of recent works (Duxbury *et al.*, 1986, 1987; Gomez *et al.*, 1993c; Duxbury and Leath, 1994) there are few reliable results. Although all the models belonging to the *local load-sharing* (LLS) scheme are quite simple in principle (an almost invariably one-dimensional), they appear to contain many of the key scaling properties of more complex, higher dimensional models. The classical LLS model (Harlow and Phoenix (1978a, b) consists of a set of  $N_0$  elements burdened uniformly with a given load (weight, stress, etc.) per element, in which the local failure thresholds are drawn from a continuous distribution, such as the Weibull distribution (Weibull, 1939):

$$p_{\sigma} = 1 - e^{-\sigma^{\rho}}, \quad (1)$$

(where  $\rho$  is an integer called the shape parameter or Weibull index, and  $\sigma$  is the load, measured in a prescribed unit, acting on the element), and in which local stress



enhancements occur after local failure. The succession of produced failures ends either with a total collapse, or with a partial collapse of the system. In every case an important goal is to calculate the strength of the whole set in terms of the probabilistic properties of the individual elements. The probability of total collapse of a set of  $N_0$  elements, initially loaded with a weight  $\sigma_0$  per element, will be denoted by  $P_{\sigma_0}(N_0)$ .

A third group of fiber-bundle models of fracture rely on the *scale invariance* of the process of fracture, and try to mimic this scale invariance using hierarchical structures of the fractal-tree type (Turcotte *et al.*, 1985, Smalley *et al.*, 1985, Newman and Gabrielov 1991, Gómez *et al.*, 1993a, Newman *et al.*, 1994). There is substantial evidence in the material science and, especially, in the geophysical literature that *universal scaling laws* for failure can possibly emerge (the best known of these relations is the Gutenberg-Richter magnitude-frequency law, which relates the "size" of an earthquake to the relative occurrence of such events) and, consequently, these models try to elucidate the patterns and scaling of failure of the macroscopic system given that the microscopic properties are known (in principle!). We called these group of models the *fractal load-sharing* (FLS) models, due to the general hierarchical, fractal-tree-like structure common to them. Also due to this hierarchical structure, they are readily solved using renormalization group methods (Newman *et al.*, 1994).

In the standard application of all these models (ELS, LLS, and FLS), the total load applied to the system is kept constant and thus, at any step in the process of breaking, the sum of the weights acting on the surviving elements remains unaltered (see Gómez *et al.*, 1993a for a review of the conservative models). This seems reasonable when one is dealing with a man-scale system, as a bundle of fibres, a cable, or a piece of composite material stressed during a laboratory experiment, but not when one intends to apply these models to a large fracture system as for example a tectonic fault (Turcotte *et al.*, 1985, Smalley *et al.*, 1985). In this second case, a non-negligible fraction of the stress stored in the elements is lost during the transfer events and the system, as a whole, is partially relaxed (Lachenbruch and Sass, 1980, Scholz, 1990). The 'migration' of stress through the boundaries of our system depends on the physical properties of the elements, of the embedding materials and on the relative topology of the system and the surroundings.

Thus, the question we want to address here is: How the known properties of the stochastic fiber-bundle models are modified when the concept of stress dissipation is included? In the next sections we will analyse this question for the three standard modalities of load transfer. In Section 2 we will analyse the ELS model. Section 3 is devoted to the LLS model. Here we will first consider 1-dimensional models in the standard two-sided mode, and in a new simplified one-sided version. In these models, we will also distinguish between the case in which the state of loading of the system remembers how that situation was reached, and the case where it is insensitive to the previous process. In a second instance, we will also analyze LLS models in 2 dimensions, of the type with memory. In Section 4, we will analyse the fractal load-sharing (FLS) models in 1- and 2-dimensions. Finally, in Section 5 we will state our conclusions.



## 2. Equal load-sharing models

For this mean field, "democratic" scheme, let us first deduce the value of the critical load, using a recursion method. Phoenix (1978) used a similar recurrence scheme, but casted in a more rigorous procedure. We will end up with the same recursion relation, but from an intuitive viewpoint, imitating the way a Monte Carlo simulation of the process works. Let us denote by  $\sigma_0$  the load per element in the initial loading of the system, and we have to calculate the probability of total collapse of a system formed by  $N_0$  elements, as a function of  $\sigma_0$ .

By the very nature of this model, if at a given stage of breaking the number of surviving elements is  $N$ , then the load that they actually bear,  $\sigma$ , fulfils the relation

$$N_0\sigma_0 = N\sigma. \quad (2)$$

Just after the initial loading, when the elements support a weight  $\sigma_0$ , the number of "casualties",  $\Delta_1$ , derived from it would be

$$\Delta_1 = N_0 p_{\sigma_0} = N_0(1 - e^{-\sigma_0^p}) = N_0 - N_0 e^{-\sigma_0^p}. \quad (3)$$

Hence, the number of surviving elements,  $N_1$ , after this first sweep is

$$N_1 = N_0 e^{-\sigma_0^p}. \quad (4)$$

It is convenient to normalise the number of surviving elements at each stage with respect to  $N_0$ ; thus, defining  $y_i \equiv N_i / N_0$ , eq.(4) reads

$$y_1 = e^{-\sigma_0^p}. \quad (5)$$

Now, in the 2nd sweep of breaking  $\Delta_2$  elements will fail; this number can be calculated by multiplying the number of surviving elements after the first sweep,  $N_1$ , by the conditional probability of breaking under the load  $\sigma_1$ , having survived a load  $\sigma_0$ . In our notation, this leads to

$$\Delta_2 = N_1 \frac{p_{\sigma_1} - p_{\sigma_0}}{1 - p_{\sigma_0}}, \quad (6)$$

and therefore the fraction of surviving elements after the 2nd sweep is

$$y_2 = y_1 \frac{e^{-\sigma_1^p}}{e^{-\sigma_0^p}} = e^{-\sigma_1^p}. \quad (7)$$

This simple form for  $y_2$  holds after any number of sweeps, and thus one finds



$$y_{n+1} = e^{-\sigma_n^p} \quad (8)$$

or, using eq.(2), we finally obtain

$$y_{n+1} = e^{-(\sigma_0/y^n)^p} \quad (9)$$

This recurrence relation implies that, for  $\sigma_0$  smaller than a critical value,  $\sigma_c$ ,  $y_n$  tends to a non zero limit, denoted by  $y_\infty$ ; in other words,  $P_{\sigma_0}(N_0)=0$ , whilst for  $\sigma_0 > \sigma_c$ ,  $y_n$  tends to zero, i.e.  $P_{\sigma_0}(N_0)=1$ . This is the critical structure of the ELS model as obtained originally by Daniels (1945). Solving for  $\sigma_c$ , one analytically finds

$$\sigma_c = (\rho e)^{-1/p} \quad (10)$$

and, likewise, the fraction of surviving elements at the critical point is

$$y_\infty(\sigma_c) \equiv y_c = e^{-1/p} \quad (11)$$

The value of  $y_\infty$  for any  $\sigma < \sigma_c$  is numerically obtained by using the recursion (9), which starts at  $y_0=1$ .

Having analysed the conservative case in which the total load is maintained along the process of breaking, let us now study the situation in which in each step of transfer only a fraction  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ) of the load is transferred from a breaking element to the set of surviving ones. The other fraction,  $1-\alpha$ , is supposed to be lost.  $\alpha$ , in a sense, acts also as a correlation parameter because, in the limit of  $\alpha=0$ , each element breaks independently from the rest, and all the weight previously borne by a breaking element is completely dissipated. For simplicity,  $\alpha$  will be taken as a constant along the whole process.

For any  $\alpha$ , and sticking to the previous notation, we have that

$$y_{n+1} = y_n \frac{e^{-\sigma_n^p}}{e^{-\sigma_{n-1}^p}}, \quad (12)$$

but as eq.(2) no longer works, eq.(12) does not adopt the simple form of eq.(8) or eq.(9). The generalisation of eq.(2) to this case adopts the following recursive form

$$\sigma_{n+1} = \sigma_n \left\{ 1 + \alpha \left[ \frac{e^{\sigma_n^p}}{e^{\sigma_{n-1}^p}} - 1 \right] \right\}, \quad (13)$$

which is obtained by noting that now



$$\sigma_{n+1} = \sigma_n + \alpha \frac{\sigma_n \Delta_{n+1}}{N_{n+1}} \quad (14)$$

and hence

$$\sigma_{n+1} = \sigma_n \left[ 1 + \alpha \left( \frac{N_n}{N_{n+1}} - 1 \right) \right]. \quad (15)$$

Thus the solution of this model when  $\alpha \neq 1$  derives from the simultaneous solution of eq.(12) and eq.(13), having fixed  $\rho$ ,  $\alpha$ , and  $\sigma_0$ , and starting from  $y_0=1$ . These results are illustrated, in the case of  $\rho=2$ , in Fig. 1. (Other values of  $\rho$ , leads to similar results.) There, the fraction of surviving elements,  $y_\infty$ , is plotted versus  $\sigma_0$ . The curve  $\alpha=1$  is the standard ELS model, for which, if  $\rho=2$ ,  $\sigma_c = 0.4289$ , and  $y_c = 0.6065$  (by eqs.(10) and (11)). As  $\alpha$  gets smaller,  $\sigma_c$  moves to the right, and  $y_c$  comes down in a smooth, monotonous way. In every case, the discontinuous jump of  $y_\infty$  at the critical point, from its value at  $\sigma_c^-$  ( $y=y_\infty$ ), and at  $\sigma_c^+$  ( $y=0$ ), is clearly apparent.

Our conclusion in this section is that the critical structure of the ELS model is not qualitatively affected by the consideration of an  $\alpha < 1$ . The inclusion of dissipation provokes the growth of  $\sigma_c$ , which sounds logical because if some load is lost, a bigger value of  $\sigma_0$  must be needed to provoke the total collapse.

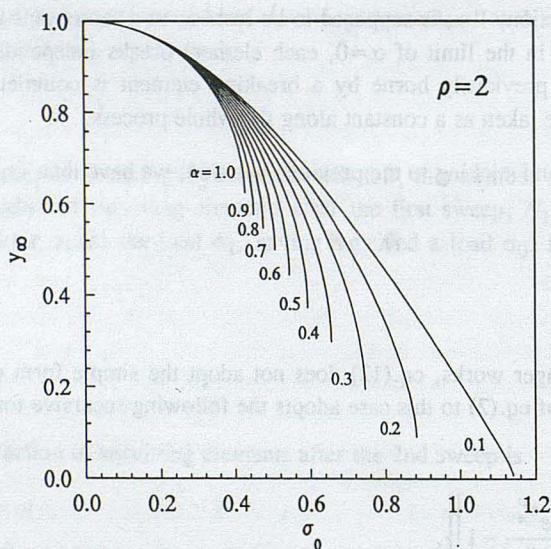


Fig. 1. Fraction of surviving elements,  $y_\infty$ , vs.  $\sigma_0$  for the ELS model, supposing different values of the dissipation factor,  $\alpha$ .



### 3. Local load-sharing models

The results presented in this section refer to LLS models. As in this type of models (as well as those belonging to the FLS of the next section) there is no critical load as occurred in the ELS case, it is convenient to define a strength for the set. This strength can be defined as that initial load, for which  $P_{\sigma_0}(N_0)$  is equal, for example, to  $1/2$ . Hence we will use the symbol  $\sigma_{1/2}$  for this concept, and it will be a function of  $N_0$ .

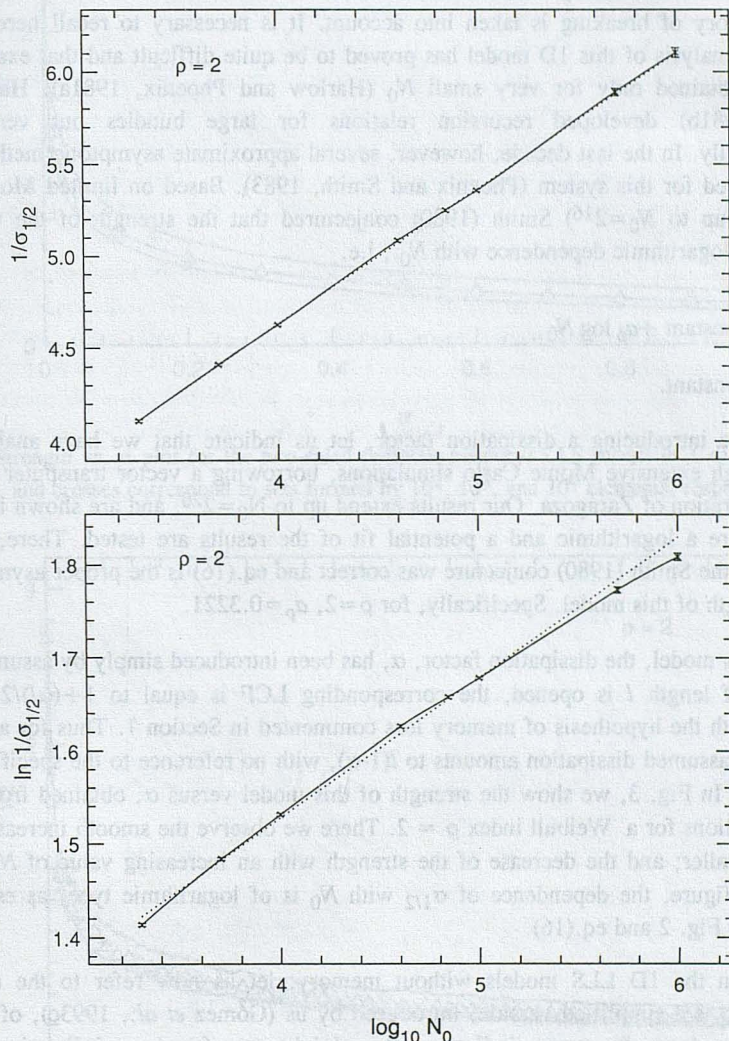


Fig. 2. Fits to  $(\sigma_{1/2})^{-1}$  in the two-sided (no-memory) LLS model, in 1 dimension. (a) Logarithmic fit. (b) Potential fit. The continuous line interpolates the Monte Carlo points and the dotted lines are (a) the pure logarithmic and (b) the pure potential dependence.



Let us start with the conventional 1D two-sided model in which if a crack of length  $l$  is opened in the chain during the breaking process, then the two limiting surviving elements support a load concentration factor (LCF) equal to  $1+l/2$  (Scop and Argon, 1969, Smith, 1980). Notice that this criterion for assigning the LCF to the surviving elements implies a loss of memory of how the crack of length  $l$  was opened: the crack history does not count, and the LCF depends only on  $l$ . (In this group of no-memory models, one can include the one in which the stress at the end of a crack is proportional to the square root of the crack length: Gotlib *et al.*, 1973). Later in this section we will discuss models in which the previous history of breaking is taken into account. It is necessary to recall here that the quantitative analysis of this 1D model has proved to be quite difficult and that exact results have been obtained only for very small  $N_0$  (Harlow and Phoenix, 1981a). Harlow and Phoenix (1981b) developed recursion relations for large bundles but very heavy computationally. In the last decade, however, several approximate asymptotic methods have been developed for this system (Phoenix and Smith, 1983). Based on limited Monte Carlo simulations (up to  $N_0=2^{16}$ ) Smith (1980) conjectured that the strength of the two-sided model had a logarithmic dependence with  $N_0$ , i.e.

$$(\sigma_{1/2})^{-1} = \text{constant} + a_p \log N_0, \quad (16)$$

$a_p$  being a constant.

Before introducing a dissipation factor, let us indicate that we have analysed this model through extensive Monte Carlo simulations, borrowing a vector transputer from the RTN collaboration of Zaragoza. Our results extend up to  $N_0=2^{20}$ , and are shown in Fig. 2a and 2b, where a logarithmic and a potential fit of the results are tested. There, one can confirm that the Smith (1980) conjecture was correct and eq.(16) is the proper asymptotic fit for the strength of this model. Specifically, for  $\rho=2$ ,  $a_p=0.3221$ .

In this model, the dissipation factor,  $\alpha$ , has been introduced simply by assuming that, if a crack of length  $l$  is opened, the corresponding LCF is equal to  $1+(\alpha l)/2$ . This is consistent with the hypothesis of memory loss commented in Section 1. Thus for a crack of length  $l$ , the assumed dissipation amounts to  $l(1-\alpha)$ , with no reference to the specific history of the crack. In Fig. 3, we show the strength of this model versus  $\alpha$ , obtained from Monte Carlo simulations for a Weibull index  $\rho = 2$ . There we observe the smooth increase of  $\sigma_{1/2}$  as  $\alpha$  gets smaller; and the decrease of the strength with an increasing value of  $N_0$ . At the right of the figure, the dependence of  $\sigma_{1/2}$  with  $N_0$  is of logarithmic type, as established previously in Fig. 2 and eq.(16).

Within the 1D LLS models without memory, let us now refer to the one-sided model, which is a simplified version, introduced by us (Gómez *et al.*, 1993c), of the two-sided one, and as its name indicates, the weight transfer is uni-directional. This simplification makes the model solvable using a simple iterative method, and in the case of no-dissipation, we have found a logarithmic dependence of the global strength as a function of  $N_0$ . As in this model the LCF is always an integer,  $(1+l)$ ,  $l$  being the length of the open crack, so its generalisation for including dissipation is carried out through the substitution



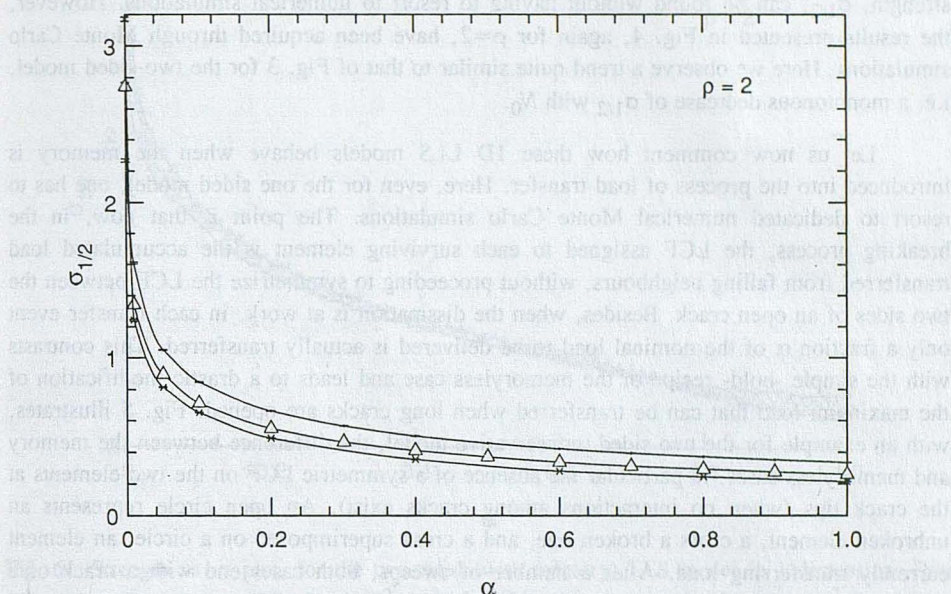


Fig. 3. Strength vs.  $\alpha$  plot for the two-sided (without memory) LLS model in 1 dimension. Dots, triangles, and crosses correspond to sets formed by  $10^2$ ,  $10^3$ , and  $10^4$  elements, respectively.

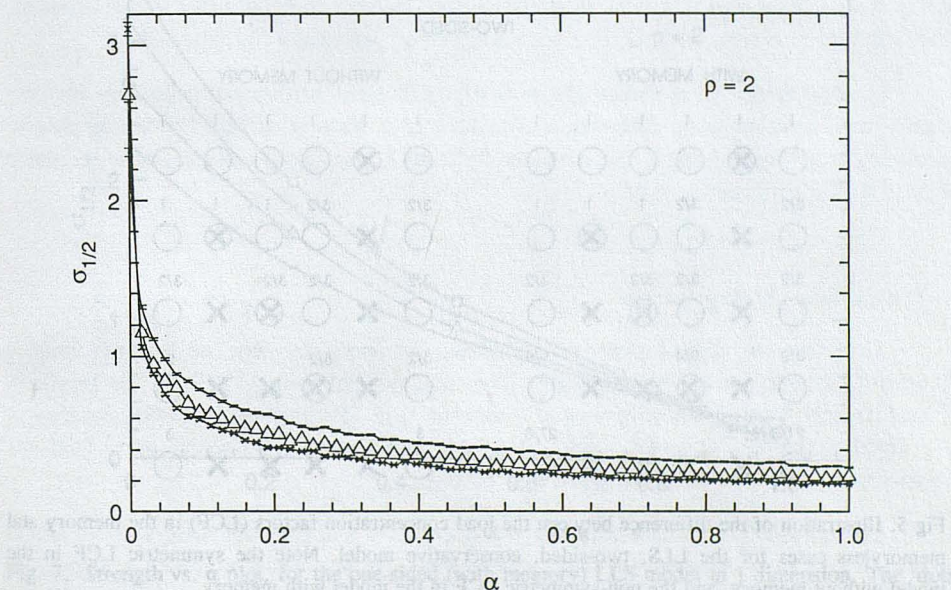


Fig. 4. Strength vs.  $\alpha$  plot, for the one-sided (without memory) LLS model in 1 dimension. Dots, triangles, and crosses stand for  $N_0 = 10^2$ ,  $10^3$ , and  $10^4$ , respectively.



$(1+l) \rightarrow (1+\alpha l)$ . The consideration of an  $\alpha < 1$  does not modify the strategy introduced in Gómez *et al.* (1993c) for obtaining the recursive solution, so that, for any  $\alpha$ , the global strength,  $\sigma_{1/2}$ , can be found without having to resort to numerical simulations. However, the results presented in Fig. 4, again for  $\rho=2$ , have been acquired through Monte Carlo simulations. Here we observe a trend quite similar to that of Fig. 3 for the two-sided model, i.e. a monotonous decrease of  $\sigma_{1/2}$  with  $N_0$ .

Let us now comment how these 1D LLS models behave when the memory is introduced into the process of load transfer. Here, even for the one sided model, one has to resort to dedicated numerical Monte Carlo simulations. The point is that now, in the breaking process, the LCF assigned to each surviving element is the accumulated load transferred from failing neighbours, without proceeding to symmetrize the LCF between the two sides of an open crack. Besides, when the dissipation is at work, in each transfer event only a fraction  $\alpha$  of the nominal load to be delivered is actually transferred. This contrasts with the simple -bold- recipe of the memoryless case and leads to a drastic modification of the maximum load that can be transferred when long cracks are opened. Fig. 5 illustrates, with an example for the two-sided, conservative model, the difference between the memory and memoryless cases, in particular the absence of a symmetric LCF on the two elements at the crack tips (when no interactions among cracks exist). An open circle represents an unbroken element, a cross a broken one, and a cross superimposed on a circle, an element currently transferring load. After a number of sweeps, both cases end with a crack of a length of 5 units, but the distribution of loads at the crack tips is different for the model with memory and for the one without memory. When interactions among cracks are taken into account, the LCF discrepancy between the two cases could be much more conspicuous.

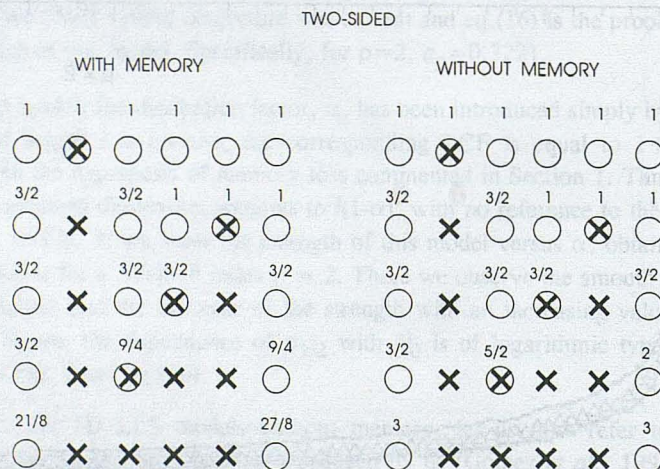


Fig 5. Illustration of the difference between the load concentration factors (LCF) in the memory and memoryless cases for the LLS, two-sided, conservative model. Note the symmetric LCF in the model without memory, and the non-symmetric LCF in the model with memory.



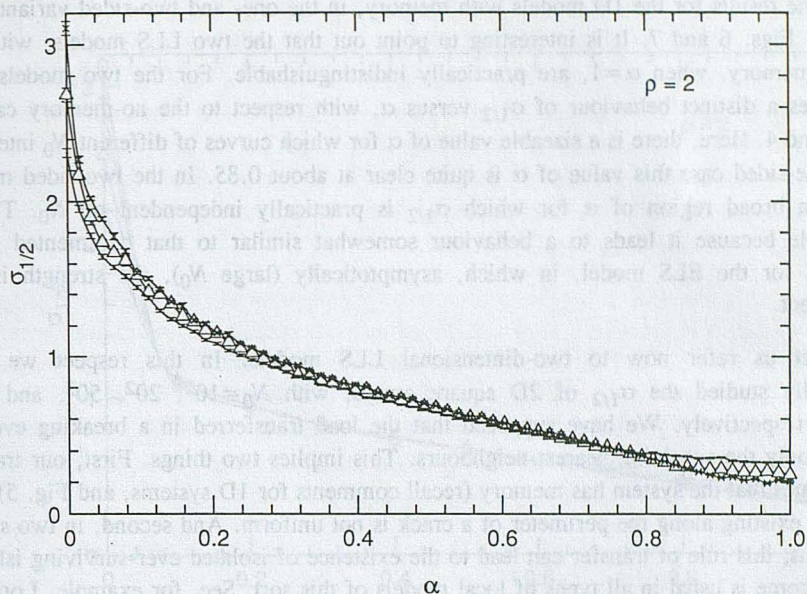


Fig. 6. Strength vs.  $\alpha$  plot, for the two-sided (with memory) LLS model in 1 dimension. Dots, triangles, and crosses stand for  $N_0 = 10^2$ ,  $10^3$ , and  $10^4$ , respectively.

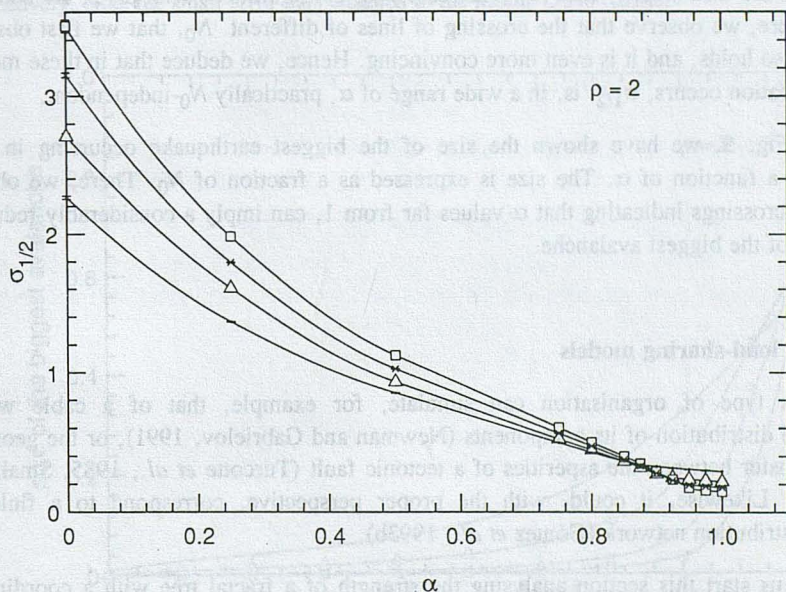


Fig. 7. Strength vs.  $\alpha$  plot, for the one-sided (with memory) LLS model in 1 dimension. The dots, triangles, crosses, and squares represent  $N_0 = 10^2$ ,  $10^3$ ,  $10^4$  and  $10^5$ , respectively.



The results for the 1D models with memory, in the one- and two-sided variants, are shown in Figs. 6 and 7. It is interesting to point out that the two LLS models, with and without memory, when  $\alpha=1$ , are practically indistinguishable. For the two models, one appreciates a distinct behaviour of  $\sigma_{1/2}$  versus  $\alpha$ , with respect to the no-memory case of Figs. 3 and 4. Here, there is a sizeable value of  $\alpha$  for which curves of different  $N_0$  intersect. In the one-sided case this value of  $\alpha$  is quite clear at about 0.85. In the two-sided model, there is a broad region of  $\alpha$  for which  $\sigma_{1/2}$  is practically independent on  $N_0$ . This is remarkable because it leads to a behaviour somewhat similar to that commented on in section 2 for the ELS model, in which, asymptotically (large  $N_0$ ), the strength is  $N_0$ -independent.

Let us refer now to two-dimensional LLS models. In this respect we have numerically studied the  $\sigma_{1/2}$  of 2D square arrays, with  $N_0=10^2$ ,  $20^2$ ,  $50^2$ , and  $100^2$  elements respectively. We have supposed that the load transferred in a breaking event is given to only the surviving nearest neighbours. This implies two things. First, our transfer rule assumes that the system has memory (recall comments for 1D systems, and Fig. 5), and the stress existing along the perimeter of a crack is not uniform. And second, in two spatial dimensions, this rule of transfer can lead to the existence of isolated ever-surviving islands. (This outcome is usual in all types of local models of this sort. See, for example, Lomnitz-Adler *et al.*, 1992). The existence of these 'islands' has led us, in this case, to define  $\sigma_{1/2}$  as the median value of the initial stress which leads to the triggering of the maximum earthquake induced in that system. The number of elements broken in these maximal earthquakes are then smaller than  $N_0$ . The results for configurations with  $\rho=2$ , are shown in Fig. 8. There, we observe that the crossing of lines of different  $N_0$ , that we first observed in Fig. 6 also holds, and it is even more convincing. Hence, we deduce that in these models, when dissipation occurs,  $\sigma_{1/2}$  is, in a wide range of  $\alpha$ , practically  $N_0$ -independent.

In Fig. 9, we have shown the size of the biggest earthquake occurring in these models, as a function of  $\alpha$ . The size is expressed as a fraction of  $N_0$ . There, we observe interesting crossings indicating that  $\alpha$  values far from 1, can imply a considerably reduction in the size of the biggest avalanche.

#### 4. Fractal load-sharing models

This type of organisation can simulate, for example, that of a cable with a hierarchical distribution of its components (Newman and Gabrielov, 1991), or the geometry of load transfer between the asperities of a tectonic fault (Turcotte *et al.*, 1985, Smalley *et al.*, 1985). Likewise, it could, with the proper perspective, correspond to a fluid (or electric) distribution network (Gómez *et al.*, 1993b).

Let us start this section analysing the strength of a fractal tree with a coordination number of two (two branches per knot). Each level, labelled by the  $n$  index, is formed by pairs of elements linked together to one element of the  $(n+1)$  floor. The latter element is



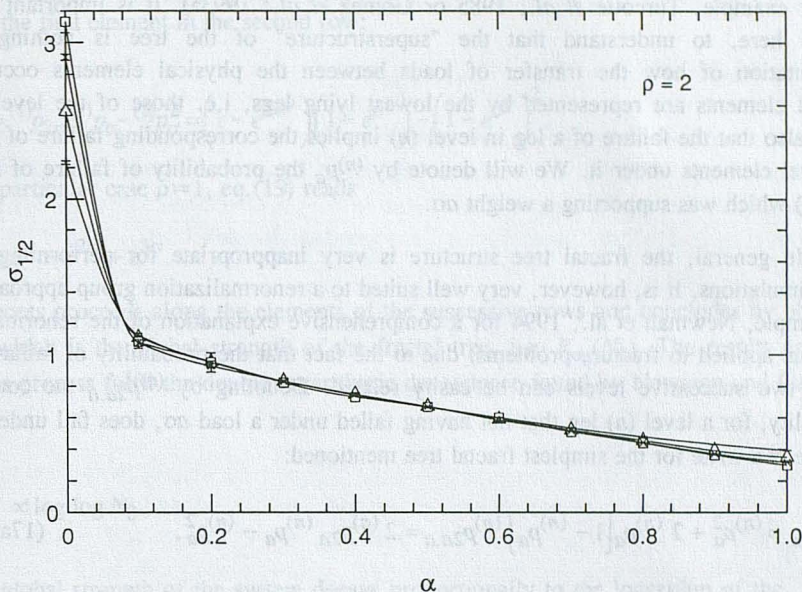


Fig. 8. Strength vs.  $\alpha$  plot, for the LLS model (with memory) in 2 dimensions. Dots, triangles, crosses, and squares stand for square arrays with  $N_0=10^2$ ,  $20^2$ ,  $50^2$ , and  $100^2$  elements, respectively. Note the small error bars attached to the Monte Carlo results.

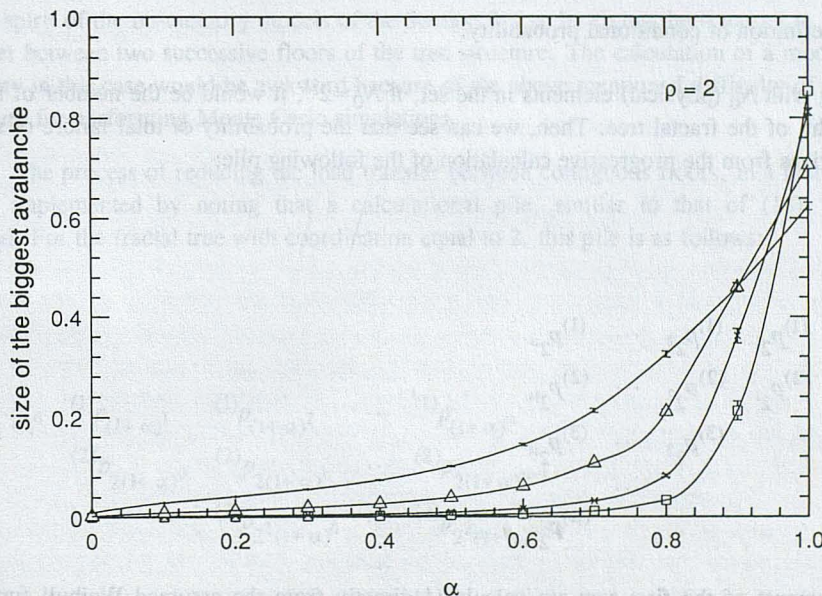


Fig. 9. Size of the biggest avalanche (expressed as a fraction of  $N_0$ ) vs.  $\alpha$  for the LLS model (with memory) in 2 dimensions. Dots, triangles, crosses, and squares stand for  $N_0=10^2$ ,  $20^2$ ,  $50^2$ , and  $100^2$ , respectively.



paired likewise so that the whole structure looks like a level-independent form (for details see, for example, Turcotte *et al.*, 1985 or Gómez *et al.*, 1993a). It is important for our purpose here, to understand that the "superstructure" of the tree is nothing but a representation of how the transfer of loads between the physical elements occurs (the physical elements are represented by the lowest lying legs, i.e. those of the level  $n=1$ ). Notice also that the failure of a leg in level ( $n$ ) implies the corresponding failure of the  $2^{n-1}$  first-level elements under it. We will denote by  $^{(n)}p_a$  the probability of failure of a leg in level ( $n$ ) which was supporting a weight  $a\sigma$ .

In general, the fractal tree structure is very inappropriate for performing Monte Carlo simulations. It is, however, very well suited to a renormalization group approach (see, for example, Newman *et al.*, 1994 for a comprehensive explanation of the renormalization technique applied to fracture problems) due to the fact that the probability of failure of the legs in two successive levels can be easily related. Denoting by  $^{(n)}p_{2a,a}$  the conditional probability, for a level ( $n$ ) leg that not having failed under a load  $a\sigma$ , does fail under a load  $2a\sigma$ , we can write for the simplest fractal tree mentioned:

$$^{(n+1)}p_{2a} = ^{(n)}p_a^2 + 2 ^{(n)}p_a [1 - ^{(n)}p_a] ^{(n)}p_{2a,a} = 2 ^{(n)}p_{2a} ^{(n)}p_a - ^{(n)}p_a^2, \quad (17a)$$

where

$$^{(n)}p_{2a,a} = \frac{^{(n)}p_{2a} - ^{(n)}p_a}{1 - ^{(n)}p_a}, \quad (17b)$$

is the definition of conditional probability.

Dealing with  $N_0$  (physical) elements in the set, if  $N_0 = 2^\mu$ ,  $\mu$  would be the number of levels, or height, of the fractal tree. Then, we can see that the probability of total failure of such a tree derives from the progressive calculation of the following pile:

$$\begin{array}{ccccccc} ^{(1)}p_{2^0} & ^{(1)}p_{2^1} & ^{(1)}p_{2^2} & \dots & ^{(1)}p_{2^\mu} & & \\ & ^{(2)}p_{2^1} & ^{(2)}p_{2^2} & \dots & ^{(2)}p_{2^\mu} & & \\ & & ^{(3)}p_{2^2} & \dots & ^{(3)}p_{2^\mu} & & \\ & & & \dots & & & \\ & & & & ^{(\mu)}p_{2^\mu} & & \end{array} \quad (18)$$

The elements of the first row are calculated directly from the assumed Weibull function, i.e.,  $^{(1)}p_{2^0} = ^{(1)}p_1 = 1 - \exp(-\sigma^p)$ ,  $^{(1)}p_{2^1} = ^{(1)}p_2 = 1 - \exp[-(2\sigma)^p]$ , etc., where  $\sigma$  is the load on



that particular leg. Each element of the 2nd row, is calculated from  $(1)p_{2i}$  and  $(1)p_{2i-1}$ , both located in the first row, using eq.(17a). As a particular example, let us compute  $(2)p_{2^1} = (2)p_{2\sigma}$ , the first element in the second row:

$$(2)p_{2\sigma} = (1)p_{2\sigma} (1)p_{\sigma} - (1)p_{\sigma}^2 = (1 - e^{2\sigma^p}) \left( (1 - e^{\sigma^p}) - (1 - e^{\sigma^p})^2 \right). \quad (19)$$

For the particular case  $p=1$ , eq.(19) reads

$$(2)p_{2\sigma} = e^{\sigma} - e^{2\sigma} + e^{3\sigma}. \quad (20)$$

This process proceeds along the elements of the successive rows and concludes by obtaining  $(\mu)p_{2^\mu}$ , which is the global strength of the fractal tree, i.e.  $P_{\sigma_0}(N_0)$ . The results emerging from this process fulfil the double logarithmic dependence found by Newman and Gabrielov (1991)

$$(\sigma_{1/2})^{-1} \propto \log \log N_0, \quad N_0 \rightarrow \infty \quad (21)$$

i.e. the global strength of the system decays proportionally to the logarithm of the number of floors (i.e., mass),  $\mu$ , of the corresponding tree.

Now, the inclusion of the concept of stress dissipation in this structure will be done in the spirit of the no-memory models of the Section 3, i.e. by fixing the fraction,  $\alpha$ , of load transfer between two successive floors of the tree structure. The calculation of a model with memory in this case would be awkward because of the above mentioned difficulty of the tree structure for performing Monte Carlo simulations.

The process of reducing the load transfer between contiguous floors, in a factor  $\alpha$ , is easily implemented by noting that a calculational pile, similar to that of (18), can be defined. For the fractal tree with coordination equal to 2, this pile is as follows:

$$\begin{array}{ccccccc} (1)p_{(1+\alpha)^0} & (1)p_{(1+\alpha)^1} & (1)p_{(1+\alpha)^2} & \dots & (1)p_{(1+\alpha)^\mu} & & \\ & (2)p_{2(1+\alpha)^0} & (2)p_{2(1+\alpha)^1} & \dots & (2)p_{2(1+\alpha)^{\mu-1}} & & \\ & & (3)p_{2^2(1+\alpha)^0} & \dots & (3)p_{2^2(1+\alpha)^{\mu-2}} & & \\ & & & \dots & & & \\ & & & & (\mu)p_{2^\mu} & & \end{array} \quad (22)$$



The scheme of calculation is analogous to that commented above, using the appropriate generalisation of eq.(17a), which now reads

$$^{(n+1)}p_{2a} = ^{(n)}p_a^2 + 2 ^{(n)}p_a [1 - ^{(n)}p_a] ^{(n)}p_{(1+\alpha)\alpha, \alpha} . \quad (23)$$

The results of this scheme are plotted in Fig. 10, for  $\rho=2$ . In this figure the dependence of  $\sigma_{1/2}$  with  $N_0$ , fulfils the double logarithmic dependence of eq.(21) and for this reason, quite distinct  $N_0$  lead to close values of  $\sigma_{1/2}$ . The general aspect of this figure is rather similar to that of Fig. 3 and there is a monotonous decrease of  $\sigma_{1/2}$  with  $\alpha$ .

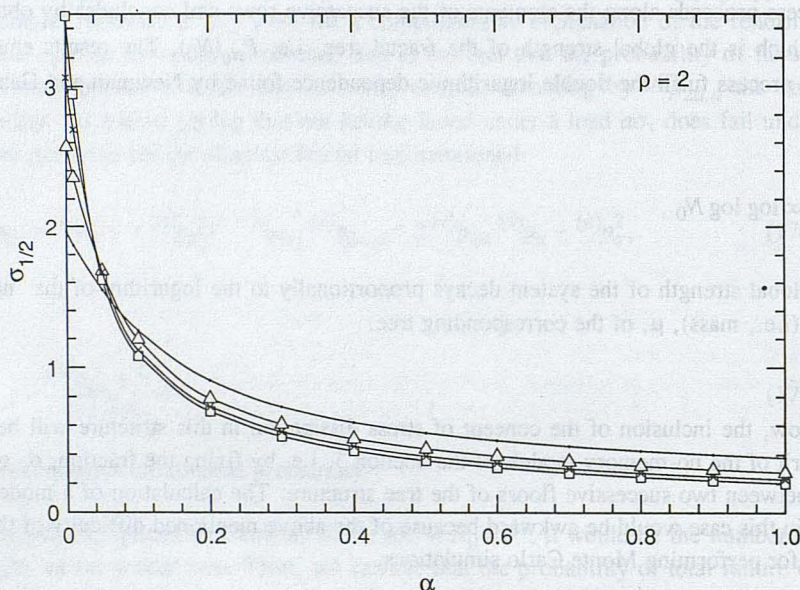


Fig. 10. Strength vs.  $\alpha$  plot, for the FLS model in 1 dimension. Dots, triangles, crosses, and squares stand for  $N_0 = 2^6, 2^{10}, 2^{14}$  and  $2^{18}$ , respectively.

We now proceed to generalise these results to a 2-dimensional hierarchical structure, using for that matter a fractal tree with a coordination number equal to 4 (this structure would correspond, for example, in a cable, to having twisted four individual fibres at a time, then four of these bundles twisted together, etc. See, for example, Newman et al., 1994 for pictorial representation of the general 2-dimensional hierarchical structure). First, one has to argue which type of transfer is conveyed within the four elements that constitute each individual bunch, in a given floor. This transfer can be of the ELS type, or local in any of its modalities. Newman and Gabrielov (1991) and Newman et al. (1994) used an ELS transfer inside each bundle, both in their 1-dimensional and 2-dimensional fractal tress. This means that the load supported by a failing bundle was transferred in equal proportion to the remaining bundles. For maximum simplicity we have chosen a local transfer of the one-sided type. This simplifies the numerology of the associated calculational



pile, without affecting the qualitative conclusions. For brevity, we omit the details of those piles and only indicate that the basic recursive relation to be used in this case is

$$\begin{aligned}
 {}^{(n+1)}p_{4a} = & {}^{(n)}p_a^4 + \\
 & 4 {}^{(n)}p_a^3 (1 - {}^{(n)}p_a) {}^{(n)}p_{(1+3\alpha)a,a} + \\
 & 4 {}^{(n)}p_a^2 (1 - {}^{(n)}p_a)^2 {}^{(n)}p_{(1+2\alpha)a,a} {}^{(n)}p_{(1+3\alpha)a,a} + \\
 & 2 {}^{(n)}p_a^2 (1 - {}^{(n)}p_a)^2 \left\{ {}^{(n)}p_{(1+\alpha)a,a}^2 + 2 \left[ {}^{(n)}p_{(1+\alpha)a,a} \left( 1 - {}^{(n)}p_{(1+\alpha)a,a} \right) {}^{(n)}p_{(1+3\alpha)a,(1+\alpha)a} \right] \right\} + \\
 & 4 {}^{(n)}p_a (1 - {}^{(n)}p_a)^3 {}^{(n)}p_{(1+\alpha)a,a} {}^{(n)}p_{(1+2\alpha)a,a} {}^{(n)}p_{(1+3\alpha)a,a}.
 \end{aligned} \tag{24}$$

In eq.(24) each term on the right hand side represents a different way in which the closed chain of four bundles of order  $(n)$  can be broken following a one-sided local load-transfer scheme. Full details of the one-sided LLS model can be found in Gómez et al. (1994), but a brief description follows. The chiral local load-sharing (QLLS) model was proposed as an analytically solvable alternative to the classical two-sided LLS model. The quirkality simplifies the model to the point of allowing its analytical solution but do not alter the qualitative properties of the (more general) local models. To have a pictorial view of the QLLS model, consider  $N$  elements positioned, in order, along a circumference and that the load transfer affects only the new unbroken elements following the one which failed. Thus, while in conventional LLS models in 1-dimension the load transferred is always divided between the two surviving elements flanking the failed one, here only one element accepts the load. As the loop of elements is closed, although the load transfer is unidirectional, a fracture initiated at any point along the circumference can give rise to an unstoppable crack, affecting the  $N$  elements. This unidirectionality introduced in the load transfer assumption simplifies the model considerably, so that the model can be expressed in a closed form using an iterative matrix method (Gómez et al., 1994).

Having described the QLLS model, it will be apparent that a chain of  $N=4$  elements (i.e., bundles of order  $(n)$ ) can be broken in five different ways. Each term in eq. (24) refers to a way of broken this  $N=4$  chain, namely: (i) all four bundles break simultaneously with a load  $a\sigma$ ; (ii) three consecutive bundles break with a load  $a\sigma$ , and the last breaks with the augmented load  $4a\sigma$ ; (iii) two consecutive bundles break simultaneously with a load  $a\sigma$ , the next bundle breaks afterwards with a load  $3a\sigma$ , and the last bundle breaks with the final load  $4a\sigma$ ; (iv) two non consecutive bundles break simultaneously with a load  $a\sigma$ ; the remaining two bundles can fail simultaneously due to the augmented load  $2a\sigma$ , or one can fail with the load  $2a\sigma$ , and the other survive until the final load  $4a\sigma$  breaks it; (v) only the first element break with a load  $a\sigma$ , and then the remaining elements fail in order with the loads  $2a\sigma$ ,  $3a\sigma$ , and  $4a\sigma$ .



The resulting strength of these "two-dimensional" fractal trees is shown, for  $\rho=2$ , in Fig. 11. There is no distinctive behaviour with respect to that of the simple fractal tree of Fig. 10, and  $\sigma_{1/2}$  diminishes monotonously with  $\alpha$ , and, for fixed  $\alpha$ , very slowly with  $N_0$ .

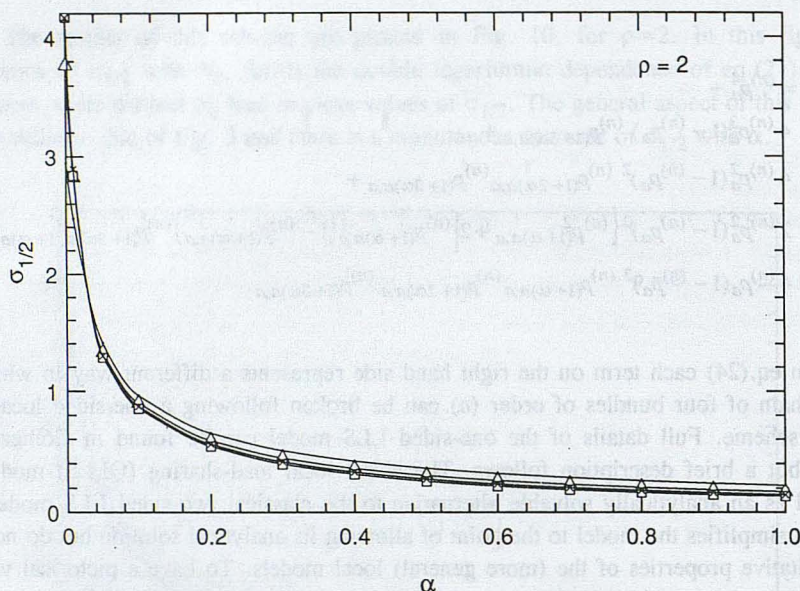


Fig. 11. Strength vs.  $\alpha$  plot, for the FLS model in 2 dimensions. Dots, triangles, crosses, and squares stand for  $N_0 = 4^6, 4^{10}, 4^{14}$  and  $4^{18}$ , respectively.

## 5. Conclusions

In this paper we have analysed the impact that stress dissipation has in the stochastic load-transfer models of fracture. Dissipation has been included in a simpler manner through a parameter  $0 \leq \alpha \leq 1$ , which measures the fraction of load that is actually transferred in any event of failure. One of our main motives for this analysis is to find out if an  $\alpha \neq 1$  is able to qualitatively modify the behaviour of these models, which could enhance their richness and scope of applicability, especially in fracture phenomena in earth sciences.

In the ELS model the critical behaviour of the model is maintained (Fig. 1), in the sense that there always exists a critical load,  $\sigma_c$ .  $\sigma_c$  increases as  $\alpha$  decreases. The fraction of surviving elements at  $\sigma = \sigma_c$  also diminishes, but there is always a finite jump for this fraction when the stress reaches  $\sigma_c$ .

Regarding LLS models, we have analysed systems in 1 and 2 spatial dimensions. We have first studied the standard -no memory- two-sided model in one dimension and showed that Smith's (1980) conjecture about the logarithmic decrease of the strength was correct (Figs. 2a and 2b). We have also discussed a new simplified no-memory, one-sided model. For both models the introduction of the dissipation parameter does not alter their qualitative behaviour, as shown in Figs. 3 and 4.



The introduction of memory in these 1D models provokes, on the contrary, an interesting crossing of the curves of  $\sigma_{1/2}$  vs.  $\alpha$ , for various  $N_0$  (see Figs. 6 and 7). The consequence is that, in a broad range of  $\alpha$ ,  $\sigma_{1/2}$  is practically independent of  $N_0$ . In other words, the existence of dissipation is able to provoke the appearance of a critical behaviour, similar to that existing in the ELS model. That is, in the limit of large  $N_0$ , for  $\sigma \leq \sigma_c$ ,  $P_{\sigma_0}(N_0)=0$ , and for  $\sigma \geq \sigma_c$ ,  $P_{\sigma_0}(N_0)=1$ . This crossing also exists in 2D LLS models, as shown in Fig. 8.

It is important to remark that in the memory-less case, there also exists a crossing of the curves at very small  $\alpha$  (see Figs. 3 and 4, and also Figs. 10 and 11). This crossing is necessary because in the  $\alpha=0$  limit, the  $N_0$  elements forming the set are completely uncorrelated; hence, the probability of total collapse is trivially calculated as the probability of individual breaking up to the  $N_0$  power. This implies that sets with bigger  $N_0$  are more difficult to break. As in the large  $\alpha$  limit the trend is the opposite, a crossing of lines must exist. From this perspective, the difference between the memory-less and the memory models is that in the latter, the crossing point receives a strong push towards large values of  $\alpha$ . In this respect, what we consider worth of emphasizing is that in the models of Fig. 6 (two-sided 1D LLS), and Fig. 8 (2D LLS), the crossing is very smooth, which allows the definition of an effective critical point.

Finally, in the hierarchically organised structures of the FLS type, we have introduced stress dissipation for trees with coordination numbers equal to 2 and 4. In this latter case, the modality of transfer between the four units forming the basic bunches has been supposed to be of the one-sided local type. For  $\alpha=1$  we have recovered the quantitative results discovered by Newman and Gabrielov (1991), whilst for arbitrary values of  $\alpha$ , the qualitative behaviour is not altered. See Figs. 10 and 11.

Throughout this work, several computational strategies have been used. The ELS model has been solved by analysing simple recursive relations. In the LLS models, except in one occasion, Monte Carlo simulations have been used. This exception refers to the one-sided model without memory, which has been studied using the strategy explained in Gómez *et al.* (1993c), where the concept of  $k$ -failure (Harlow and Phoenix, 1978a, b) permits the implementation of a simple recursive method. The fractal structures have been studied numerically through the introduction of appropriate computational piles, where one handles successive vectors. The use of Monte Carlo simulations in these models is prohibitive for two reasons. First, the hierarchical organisation would make the simulations quite cumbersome; and second, the very slow dependence of  $\sigma_{1/2}$  with  $N_0$  calls for the use of very large sets, in order to be able to obtain clear conclusions.

#### Acknowledgements.

This work was supported by the Spanish DGICYT (Project PB90-0916). We thank the RTN collaboration for informatic support.



## References

- Arcangelis, L. de, Redner, S., and Herrmann, H.J. 1985 *J. Phys. (Paris) Lett.* **46**, L585.
- Christensen, K., and Olami, Z. 1992 *Phys. Rev. A*, **46**, 1829-1838.
- McCartney, L.N. and Smith, R.L. 1983 *J. Appl. Mech.* **50**, 601-608.
- Daniels, H.E. 1945 *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **183**, 404-435.
- Duxbury, P.M., Beale, P.D., and Leath, P.L. 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1052.
- Duxbury, P.M., Leath, P.L., and Beale, P.D. 1987 *Phys. Rev. B* **36**, 367.
- Duxbury, P.M., and Leath, P.L. 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2805-2808.
- Feng, S., and Sen, P.N. 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52**, 216-219.
- Gómez, J.B., Pacheco, A.F., and Seguí, A.J. 1993a *Geophys. J. Int.* **113**, 115-124.
- Gómez, J.B., Pacheco, A.F., and Seguí, A.J. 1993b *J. Appl. Mech.* **60**, 959.
- Gómez, J.B., Iñiguez, D., and Pacheco, A.F. 1993c *Phys. Rev. Lett.* **71**, 380.
- Gotlib, Y.Y., El'yashevich, A.M., and Svetlov, Y. 1973 *Soviet Phys. Solid State* **14**, 2672-2677.
- Harlow, D.G., and Phoenix, S.L. 1978a *J. Composite Mater.* **12**, 195-214.
- Harlow, D.G., and Phoenix, S.L. 1978b *J. Composite Mater.* **12**, 314-334.
- Harlow, D.G., and Phoenix, S.L. 1981a *Int. J. Fracture* **17**, 347-372.
- Harlow, D.G., and Phoenix, S.L. 1981b *Int. J. Fracture* **17**, 601-630.
- Kantor, Y., and Webman, I. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1891-1894.
- Lachenbruch, A.H., and Sass, J.H. 1980 *J. Geophys. Res.* **85**, 6185-6223.
- Lomnitz-Adler, J., Knopoff, L., and Martinez-Meckler, G. 1992 *Phys Rev A*, **45**, 2211-2221.
- Newman, W.I., and Gabrielov, A.M. 1991 *Int. J. Fracture* **50**, 1-14.
- Newman, W.I., Gabrielov, A.M., Durand, T.A., Phoenix, S.L., and Turcotte, D.L. 1994 *Physica D* **77**, 200-216.
- Phoenix, S.L., and Smith, R.L. 1983 *Int. J. Solid Struct.* **19**, 479-496.
- Roux, S., and Guyon, E. 1985 *J. Phys. (Paris) Lett.* **46**, L999.
- Scholz, C.H. 1990 *The mechanics of earthquakes and faulting* Cambridge Univ. Press, Cambridge, 437pp.
- Scop, P.M., and Argon, A.S. *J. Composite Mater.* **3**, 30-47.
- Smalley, R.F., Turcotte, D.L., and Solla, S.A. 1985 *J. Geophys. Res.* **90**, 1894-1900.
- Smith, R.L. 1980 *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **372**, 539-553.
- Smith, R.L. and Phoenix, S.L. 1981 *J. Appl. Mech.* **48**, 75-82.
- Turcotte, D.L., Smalley, R.F., and Solla, S.A. 1985 *Nature* **313**, 617-672.
- Weibull, W. 1939 *Proc. Ing. Vetenskapad* **151**, 163.



## Nuevos datos paleobotánicos y paleoecológicos sobre la Formación Escucha en la Cuenca de Castellote (Teruel).

Pablo Muñoz-Barragán, José-Bienvenido Díez y Javier Ferrer

Área de Paleontología. Departamento de Geología. Universidad de Zaragoza.

### RESUMEN

En este trabajo se señala la presencia del helecho *Weichselia reticulata* en la Formación Escucha, dentro de la Cuenca de Castellote. Se pone de manifiesto la importancia de este taxón como indicador paleoambiental, debido a las particulares condiciones ecológicas en las que se desarrollaron sus comunidades durante el Cretácico inferior, y se aportan nuevos datos sobre su distribución paleobiogeográfica.

### ABSTRACT

The fern *Weichselia reticulata* is found in the Escucha Formation (Lower Cretaceous), Castellote basin. Due to the particular palaeoecological requirements, the finding of this taxon is important as a palaeoenvironmental marker: near to the sea shore under a warm, markedly seasonal climatic conditions. Finally, new data on its palaeobiogeographical distribution are given.

### ANTECEDENTES

La Formación Escucha fue definida inicialmente por AGUILAR *et al.* (1971) en el área tipo de Utrillas, siendo divididas las antiguas Capas de Utrillas en las formaciones Lignitos de Escucha (Aptiense sup.-Albiense) y Arenas de Utrillas. Posteriormente, CERVERA *et al.* (1976) redefinen la serie y proponen una división de la Formación Lignitos de Escucha en tres miembros, en la que el miembro inferior coincidiría con el estratotipo definido por AGUILAR *et al.* (1971). Sobre esta base PARDO y VILLENA (1979) redefinen nuevamente la Formación entre el Aptiense calcáreo y la Formación Utrillas, deduciendo una edad Aptiense superior-Albiense inferior para la Formación Escucha. Caracterizan los tres miembros, que presentan como una megasecuencia negativa con una sucesión de ambientes de plataforma, palustres y aluviales, y definen sus límites. Estos autores son los primeros en elaborar un mapa de isopacas referido exclusivamente a la Formación Escucha (en el que se diferencia claramente la cuenca de Castellote como una de las dos cuencas de mayor magnitud en todo el sector oriental de la Rama Aragonesa de la Cordillera Ibérica), proponiendo para la misma el ambiente de sedimentación de tipo deltaico ya mencionado. La paleogeografía propuesta es corroborada para el área del



## ESTRATIGRAFIA

Estratigráficamente la Formación Escucha constituye un conjunto esencialmente detrítico, con facies heterogéneas entre las que destacan por su interés económico los niveles de lignitos. Está constituida por tres miembros (PARDO *et al.*, 1987) diferenciados en función de sus características estratigráficas y sedimentológicas.

El Miembro Inferior, equivalente a la definición de la Formación Escucha que realizaron AGUILAR *et al.* (1971), se compone de lutitas grises y margas de color caqui con intercalaciones de areniscas rojizas a grises en cuerpos de tendencia tabular y potencia métrica. Aparecen niveles carbonatados englobados en los tramos más blandos, así como capas de lignito de potencia centimétrica a métrica.

Dentro de este Miembro se describen diferentes ambientes sedimentarios que se suceden en la vertical, a partir de tres asociaciones de facies interpretadas como la implantación de un medio continental por medio de una llanura aluvial costera, el relleno de un *lagoon* y llanuras arenoso-lutíticas dominadas por el oleaje.

La edad propuesta para este miembro a partir de los fósiles encontrados en las lumaquelas de sus tramos inferiores es Aptiense superior - Albiense inferior.

El Miembro Medio está constituido por lutitas grises y negras, con niveles de lignito explotables, entre los que se intercalan cuerpos laminares de arenas y limos de grano fino en los que aparece la paleoflora descrita en este artículo.

Sedimentológicamente este Miembro está compuesto por una sucesión de secuencias esencialmente lutíticas de gran continuidad lateral y potencia métrica. Destacan las capas de lignito con elevado contenido en sulfuros y yeso secundario. En el último término de la secuencia aparecen las arenas de grano fino con gran cantidad de restos vegetales en la zona de estudio. A techo del mismo aparecen perforaciones debidas a raíces y costras ferruginosas.

Los materiales que constituyen este Miembro habrían sido depositados por decantación, apreciándose acumulación de restos vegetales y aportes cada vez más importantes de material detrítico, por lo que estas asociaciones se interpretan como depósitos de colmatación de marismas.

El Miembro Superior está constituido por limos arcillosos de colores claros con intercalaciones de potentes niveles de arenas blancas y amarillentas. Los tres tipos de secuencias básicas que se describen para el mismo se interpretan como canales estuarinos, canales con tendencia meandriforme e influencia mareal y una tercera, de génesis menos clara, posiblemente formada por oleajes provocados por tormentas.

Los materiales referidos en este estudio corresponden, por sus características sedimentológicas, a los descritos en este apartado como Miembro Inferior de la Formación Escucha.



## GEOLOGIA REGIONAL

Regionalmente, el nivel fosilífero de Alcaine se ubica dentro de los materiales mesozoicos del sector oriental de la Cordillera Ibérica conocido como Rama Aragonesa, separada de la Rama Castellana o sector occidental por la fosa terciaria de Calatayud-Teruel. En esta zona afloran materiales cuyas edades abarcan desde el Precámbrico hasta el Terciario, siendo la disposición y la distribución de los mismos un efecto directo de la historia geológica que, durante millones de años, ha modelado sus características estratigráficas, sedimentológicas, paleontológicas y estructurales.

El hecho de que la Cordillera Ibérica se haya visto afectada por dos grandes ciclos orogénicos (el Hercínico y el Alpino) bien diferenciados ha dado lugar a que el estilo tectónico de la misma sea del tipo de zócalo y cobertera. Tras el Ciclo Hercínico y la posterior etapa de fracturación tardihercínica del Estefaniense y el Pérmico, los materiales precámbricos y paleozoicos constituyen el zócalo de la Cordillera. Estos materiales, junto con los del Mesozoico y el Terciario que conforman la cobertera, fueron posteriormente afectados por los movimientos orogénicos del Ciclo Alpino. Es este último ciclo el que, en su etapa de distensión cretácica, condiciona el depósito de los materiales sobre los que se desarrollaron los procesos biológicos y de fosilización que afectaron a los ejemplares estudiados.

Siguiendo un orden cronológico a partir de la finalización del Paleozoico, tras la etapa de fracturación tardihercínica y la sedimentación molásica del Pérmico, la Cadena Ibérica se ve sometida a un régimen distensivo que señala el inicio del Ciclo Alpino. Esta fase provoca una tectónica de bloques debida a la reactivación de las antiguas fracturas tardihercínicas y, como resultado de este proceso, la aparición en el zócalo de umbrales y surcos que van a actuar como zonas de erosión y depósito respectivamente. Tiene así lugar la sedimentación de los materiales triásicos y jurásicos siguiendo el modelo de tipo aulacógeno propuesto por ALVARO *et al.* (1978). Este depósito comienza con una etapa de subsidencia por *rifting* (Triásico Inferior y Medio) que disminuye progresivamente hasta pasar a una etapa de subsidencia térmica durante el Triásico Superior. A comienzos del Jurásico se instala una extensa plataforma carbonatada en toda la región. La elevada producción de carbonatos durante este periodo hace que la tasa de sedimentación sea muy similar a la de subsidencia, por lo que los depósitos dominantes dan lugar a la formación de facies someras.

La apertura del Golfo de Vizcaya y la subsecuente rotación antihoraria de la Península Ibérica a finales del Jurásico Superior da lugar a una nueva etapa de actividad tectónica que condiciona toda la sedimentación cretácica de la Cordillera Ibérica. Durante el Cretácico Inferior, coincidiendo con el inicio de una nueva fase de *rifting* (SALAS y CASAS, 1993), se instaura una tectónica de carácter distensivo que provoca otra reactivación de las fallas tardihercínicas. En esta ocasión la articulación de la Cadena en surcos y umbrales afecta también a los materiales de la cobertera triásicos y jurásicos depositados hasta el momento, que son denudados en las zonas de erosión.

A partir de este momento, y centrándonos ya en el área del Maestrazgo se suceden una etapa de progradación y otra de retrogradación que dan lugar al depósito de las facies continentales del *Weald* y a las facies marinas del *Urgon*. En la zona de estudio este tipo de sedimentación



perdura hasta finales del Aptiense, momento en el que una nueva progradación da lugar al depósito continental de la Formación Escucha en la que aparece el nivel fosilífero estudiado. La sedimentación de esta Formación se produce a favor de un gran aparato deltaico cuya distribución areal de subambientes y situación paleogeográfica llevan a QUEROL y SALAS (1988) a proponerlo como un sistema de delta-estuario.

### PALEOBOTANICA

La flora hallada en el nivel fosilífero de Alcaine consta de una sola especie identificable hasta el momento, el helecho *Weichselia reticulata* (STOKES et WEBB) FONTAINE, el cual es totalmente dominante.

Aunque la relación de esta especie con las Matoniáceas es clara, debido a la presencia de soros recubiertos por el indusio y a la similitud de las esporas, presenta una serie de caracteres que la apartan de los miembros conocidos de esta familia. Entre estos caracteres, ALVIN (1971) señala la estructura bipinnada de las divisiones primarias de las frondes, la dictiostela policíclica, la aparente presencia en los tallos de rizóforos o raíces-soporte, y las pínulas fértiles filiformes, no laminares, con los soros agrupados en estructuras redondeadas. Por todo ello, de acuerdo con la propuesta de ZIMMERMANN (1959), actualmente se sitúa esta especie en una familia aparte, las Weichseliáceas, muy tempranamente derivada y especializada a partir de las primitivas Matoniáceas.

La reconstrucción más aceptada es la propuesta por ALVIN (l.c.) (fig. 1), que muestra a *Weichselia reticulata* como un helecho arborescente, de tallo masivo, que puede alcanzar hasta 15 cm de diámetro. El contorno del tallo es irregular, debido a la presencia de las bases de los peciolo dispuestas de forma espiralada, y a los órganos de tipo rizoforal orientados en dirección opuesta al peciolo. La superficie de los tallos, peciolo y rizóforos es netamente rugosa, con pequeños tubérculos diseminados por todo el tallo.

Las frondes vegetativas constan de un peciolo, con una estructura similar a la del tallo, de cuyo ápice parten las pinnas primarias, dispuestas de forma palmada. De ellas parten las pinnas secundarias con sus correspondientes pínulas. Las pínulas miden aproximadamente unos 5 mm de longitud y están unidas por toda su base al raquis de la pinna. Presentan una típica venación reticulada, con una vena principal claramente marcada (fig. 2), y poseen una cutícula gruesa, con los estomas hundidos.

Las frondes fértiles son también bipinnadas, pero tienen una estructura filiforme, no laminar. De las pinnas de último orden nacen los soros agrupados en estructuras redondeadas, cada una de las cuales lleva unos 12 esporangios, totalmente recubiertos por el indusio.

El material fósil de Alcaine consta fundamentalmente de impresiones de frondes vegetativas y, en menor medida, de fragmentos de tallos. No se han encontrado hasta el momento estructuras reproductoras.

Las frondes vegetativas son muy abundantes y, en general, presentan un buen estado de preservación. En muchos casos se conserva la estructura de las pinnas primarias y se puede observar la inserción en ellas de las pinnas secundarias (ver Lámina). También está bien conservada la venación de las pínulas (fig 2).



Los fragmentos de tallos son menos numerosos, pero no son raros. Presentan el contorno irregular típico de la especie, debido a la presencia de los restos de la base de los peciolos y de los órganos rizoforales.

Todas las características morfológicas de los fósiles hallados en Alcaine se corresponden con las definidas para *Weichselia reticulata*, de tal forma, que su atribución taxonómica no ofrece dudas.

El material fósil estudiado en el presente trabajo se encuentra depositado en el Museo Paleontológico de la Universidad de Zaragoza.

#### PALEO GEOGRAFIA

*Weichselia reticulata* es un especie con una amplia distribución durante el Cretácico inferior. ALVIN (1971) recopila citas de numerosas localidades de Europa, de Siberia y Asia central, Oriente medio, mitad septentrional de Africa, norte de la India, norte de Sudamérica y sur de Norteamérica. Sin embargo, no tiene una distribución cosmopolita, pues falta en Australia, sudeste de Asia, sur de Africa, sur de Sudamérica, norte de Norteamérica y nordeste de Siberia.

Según los datos de MASSE *et. al.* (1993) sobre la distribución de los continentes en el Aptiense inferior (fig. 3), todas las localidades citadas estarían situadas entre las paleolatitudes 40° N y 40° S, y próximas a la línea costera del Tethys. *Weichselia reticulata* sería, pues, según estos datos, un helecho propio de las zonas tropicales y templado-cálidas, con clara influencia marítima.

La localidad de Alcaine estaría situada, según la citada reconstrucción paleogeográfica, aproximadamente entre los 20 y 30° de latitud Norte. Por otra parte, como ya se ha mencionado, la Formación Escucha representaría un sistema delta-estuario, por lo cual, esta localidad se situaría presumiblemente, muy cercana al mar. Los datos presentados en este trabajo confirman, pues, la distribución paleogeográfica atribuida hasta ahora a *Weichselia reticulata*.

#### PALEO ECOLOGIA

*Weichselia reticulata* posee una serie de características claramente xeromórficas, como son: la presencia de una cutícula gruesa, los estomas hundidos, los ejes con una capa externa endurecida y la orientación de las pinnulas en forma de "alas de mariposa", para evitar la máxima insolación, como se observa en plantas actuales de climas cálidos y secos. Sin embargo, la presencia de órganos de tipo "rizóforo" sugeriría un medio pantanoso, quizás con presencia de aguas salobres, próximo al mar (DABER, 1968).

Por otra parte, como señalan WATSON & ALVIN (1996), la presencia de los soros con los esporangios completamente encerrados por el indusio, endurecido y sin ninguna vía clara para la salida de las esporas, recuerda a las estructuras reproductoras de algunas Angiospermas y Coníferas actuales de "fire-climax", cuyas semillas sólo quedan libres después de que los frutos o las piñas hayan sido quemadas por el fuego.



Además, existe el hecho reiteradamente constatado, y confirmado por los datos presentados en este trabajo, de que la presencia de restos abundantes de *Weichselia reticulata* en un nivel determinado, rara vez está asociada con la existencia de otras plantas en ese nivel, lo cual, refuerza la idea de que este helecho es dominante en algún tipo de medio de características ecológicas extremas.

Todos estos hechos nos llevan a pensar que *Weichselia reticulata* sería la planta dominante (prácticamente exclusiva) de una comunidad que viviría en medios próximos a la costa, con una alternancia de períodos húmedos, en los cuales el suelo estaría incluso inundado, y de períodos secos, durante los que serían frecuentes los incendios.

### CONCLUSIONES

El hallazgo de un nivel fosilífero con restos abundantes y bien conservados del helecho *Weichselia reticulata* en un afloramiento de la Formación Escucha próximo a Alcaine (Teruel), permite aportar nuevos datos paleontológicos para el conocimiento de esta formación en la Cuenca de Castellote.

El estudio de los ejemplares recolectados hasta el momento, confirma la reconstrucción morfológica propuesta por ALVIN (1971) y permite añadir una nueva localidad al área de distribución de este interesante taxón.

Los datos sedimentológicos y paleogeográficos previos son coherentes con los deducidos a partir del estudio paleobotánico, y reafirman la idea de que *Weichselia reticulata* era un helecho con amplia distribución en las zonas tropicales y templado-cálidas, próximas al mar.

Las peculiares características morfológicas y de fosilización de *Weichselia reticulata* hacen suponer que se trataba de un helecho que formaba una comunidad prácticamente monoespecífica, que se desarrollaba en un ambiente cálido, próximo al mar, y con una alternancia de períodos húmedos, con suelo inundado, y períodos secos, con frecuentes incendios.

Todos estos hechos muestran la importancia de este nivel fosilífero, y su interés para el mejor conocimiento de la paleoecología de este sector de la Cordillera Ibérica durante el Cretácico inferior.

### AGRADECIMIENTOS

Esta investigación ha sido realizada gracias a las subvenciones y ayuda del proyecto CONAI PCB 06/93, el programa Europa-CAI, y la colaboración del Museo Paleontológico de la Universidad de Zaragoza. También queremos agradecer la inestimable colaboración de D. Mariano Candial, descubridor del yacimiento y de D. Cipriano Gil, alcalde de Alcaine.

### BIBLIOGRAFIA

AGUILAR, M., RAMIREZ DEL POZO, J. Y RIBA, O. 1971. Algunas precisiones sobre la sedimentación y paleoecología del Cretácico Inferior en la zona de Utrillas-Villaroya de los Pinares (Teruel). *Est. Geol.* 27: 497-512.



- ALVARO, M., CAPOTE, R. Y VEGAS, R. 1978. Un modelo de evolución geotécnica para la Cadena Celtibérica. *Acta Geol. Hispa. Homenatge a Lluís Solé i Sabaris*, **14**: 172-177.
- ALVIN, K. L. 1971. *Weichselia reticulata* (Stokes & Webb) Fontaine from the Wealden of Belgium. *Mem. Inst. Roy. Sci. Nat. Belgique*, **166**: 1-33.
- CERVERA, A., PARDO, G. Y VILLENA, J. 1976. Algunas precisiones litoestratigráficas sobre la formación "Lignitos de Escucha". *Tecniterrae*, **14**: 25-33.
- DABER, R. 1968. A *Weichselia-Stiehleria* Matoniaceae community within the Quedlinburg Estuary of Lower Cretaceous age. *J. Linn. Soc. (Bot.)*, **61**: 75-85.
- MARTIN, L. 1986. Síntesis geológico-minera de las cuencas lignitíferas de Oliete-Ariño, Utrillas-Aliaga y Castellote. ITGE, pp. 3-231.
- MASSE, J.P., BELLION, Y., BENKHELIL, J., DERCOURT, J., GUIRAUD & RICOU, L. E.. In: Dercourt, J., Ricou, L.E. & Vrielynck, B. (eds.). Atlas Tethys Palaeoenvironments Maps. Sponsored by Scientific Group TETHYS: BP, BRGM, CFP-TOTAL, CNRS/INSU, ELF/AQUITAYNE, IFP, IFREMER, SHELL, UPMC,
- PARDO, G. Y VILLENA, J. 1979. Características sedimentológicas y paleogeográficas de la Formación Escucha. *Cuadernos de Geología Ibérica*, **5**: 407-418.
- PARDO, G.; ARDEROL, L. Y VILLENA, J. 1991. Sedimentología de las Fms. Escucha y Utrillas. In: Mapa Geológico de España. Escala 1:200.000. Daroca (nº40). Inst. Tecnol. Geom. de España. Madrid.
- QUEROL, X. Y SALAS, R. 1988. El sistema deposicional deltaico del Albiense medio de la cuenca del Maestrazgo (Cordillera Ibérica Oriental). *Resúmenes de la Com. II Congr. Geol. de España*, vol. **1**: 173-176.
- SALAS, R Y CASAS, A. 1993. Mesozoic extensional tectonics, stratigraphy and crustal evolution during the Alpine cycle in the eastern Iberian basin. *Tectonophysics*, **228**: 33-55.
- WATSON, J. & ALVIN, K. L. 1996. An English Wealden flora list, with comments on possible environmental indicators. *Cretaceous Research*, **17** (1): 5-26.
- ZIMMERMANN, W. 1959. Die Phylogenie der Pflanzen. Stuttgart.



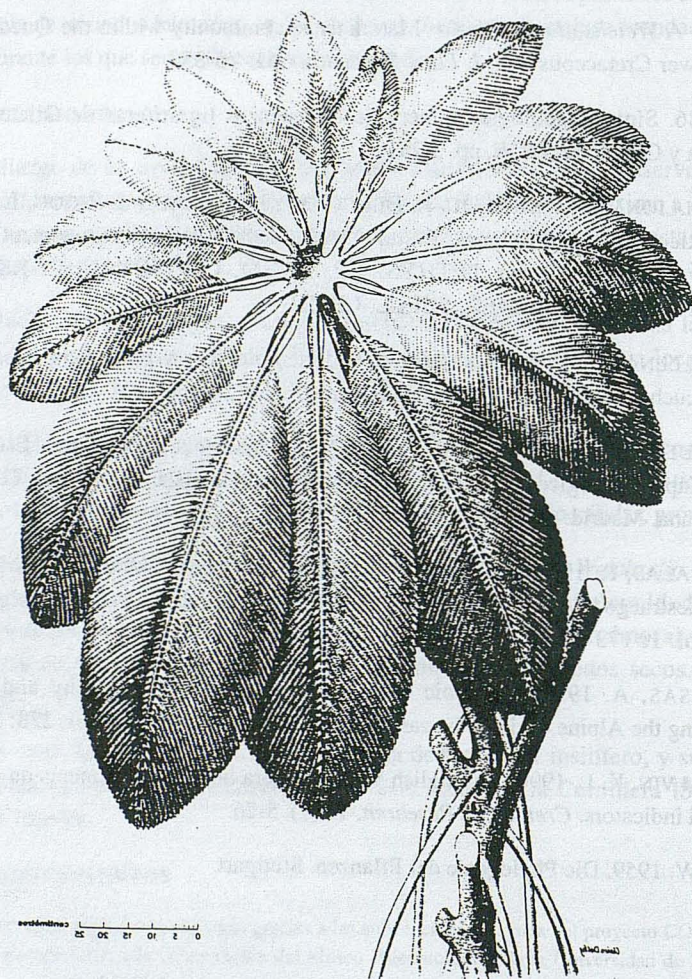


Figura 1: Reconstrucción de *Weichselia reticulata* (según ALVIN. 1971).





Figura 2: Detalle de la venación de las pinnulas.

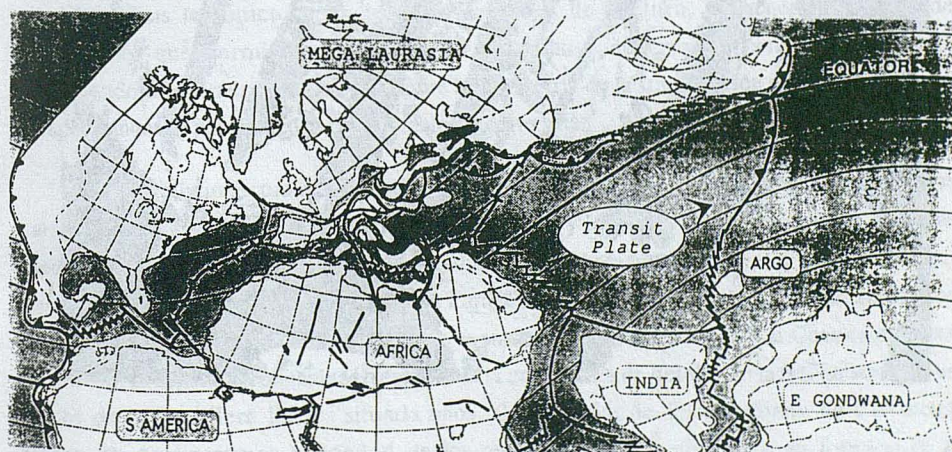


Figura 3: Distribución de los continentes en el Aptiense (según MASSE et al., 1993).



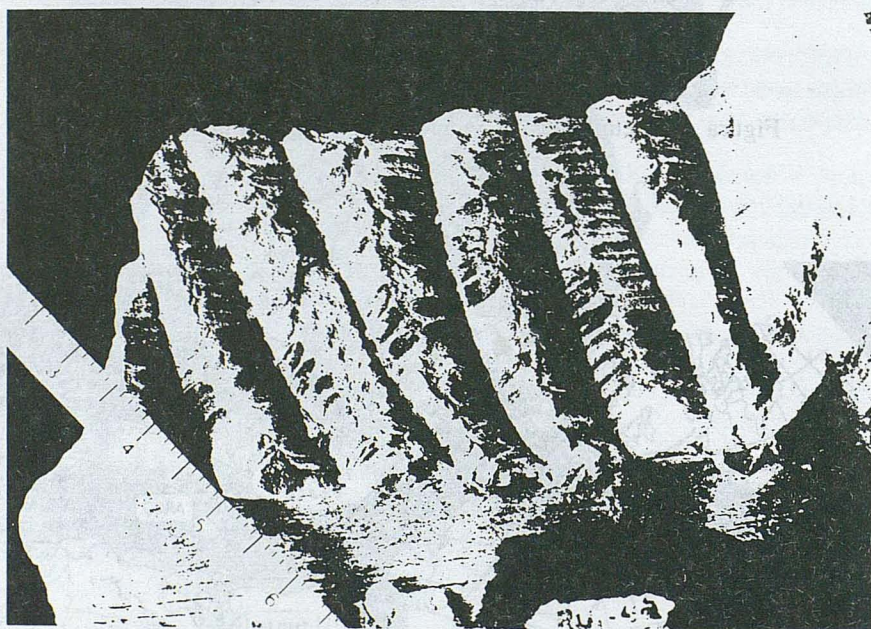


Lámina: *Weichselia reticulata*

- A) Inserción de las pinnas secundarias en el raquis de la pinna primaria
- B) Pinnas secundarias



## **PROBLEMAS METODOLÓGICOS EN EL ANÁLISIS DE LINEAMIENTOS TECTÓNICOS MEDIANTE PROGRAMAS DE TRATAMIENTO DIGITAL DE IMÁGENES**

**C.L. Liesa y L.E. Arlegui**

Area de Geodinámica. Departamento de Ciencias de la Tierra.  
Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza (España)

### **Abstract**

The analysis of lineaments and fractures from remote sensing data (satellite imagery, or aerial photograph) involves the treatment of large data sets. Automatic evaluation of such data is a powerful tool in the statistic approach to the fracture geometry and properties. However, such automatic evaluation incorporates some methodological drawbacks, as the problem of assessing the true orientation of short lines (modellized with a small amount of pixels) and the true length of oblique fractures. The solutions of those problems are on the use of work scales in which the lines to be analysed display larger lengths, and on the use of some trigonometrical expressions to correct the length according the fracture-strike.

### **1. Introducción**

El análisis tectónico de lineamientos o líneas de fractura, en general, necesita de mecanismos que permitan el tratamiento cuantitativo de grandes conjuntos de datos, permitiendo así extraer conclusiones sobre la geometría de la fracturación en diferentes áreas y capacitándonos para efectuar comparaciones entre ellas.

En este trabajo estudiamos la fiabilidad de los resultados obtenidos al analizar las características geométricas (básicamente orientación y longitud) de dos conjuntos de líneas mediante un programa de exploración automático elaborado en el Centro de Tratamiento Digital de Imágenes de la Universidad de Zaragoza. El primer conjunto es la materialización de los lineamientos tectónicos observados en una imagen LANDSAT de la Cuenca del Ebro (figura 1). El segundo conjunto corresponde a la cartografía de detalle de la fracturación de un sector de la Cordillera Ibérica situada unos 20 km al Sur de Teruel (Sierra de Camarena, figura 2). Analizaremos la bondad de los resultados brutos obtenidos en función de la mecánica de obtención de los mismos, identificaremos los problemas que presenta este tratamiento y propondremos una serie de soluciones metodológicas para solventar los problemas encontrados.



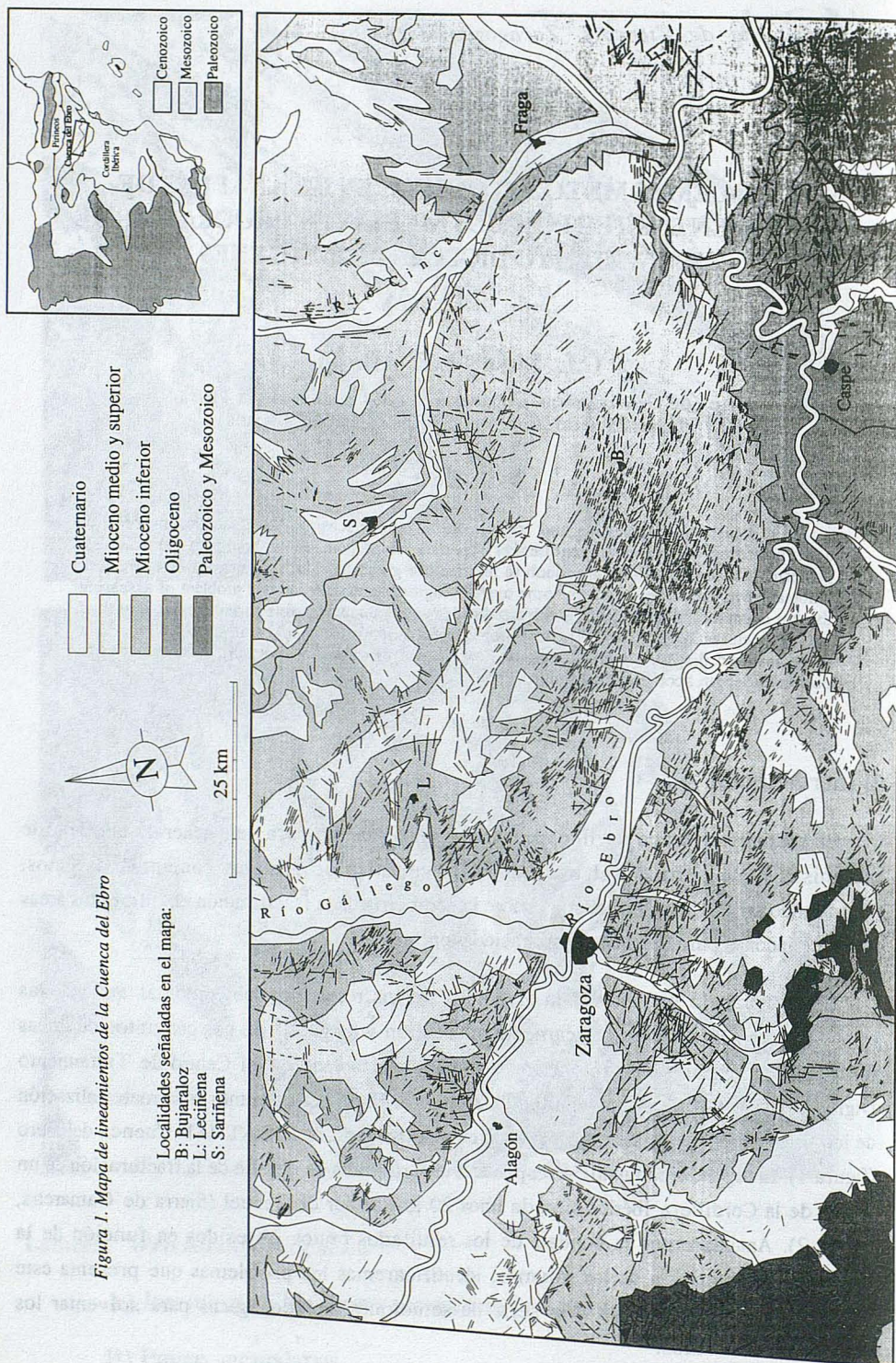


Figura 1. Mapa de lineamientos de la Cuenca del Ebro



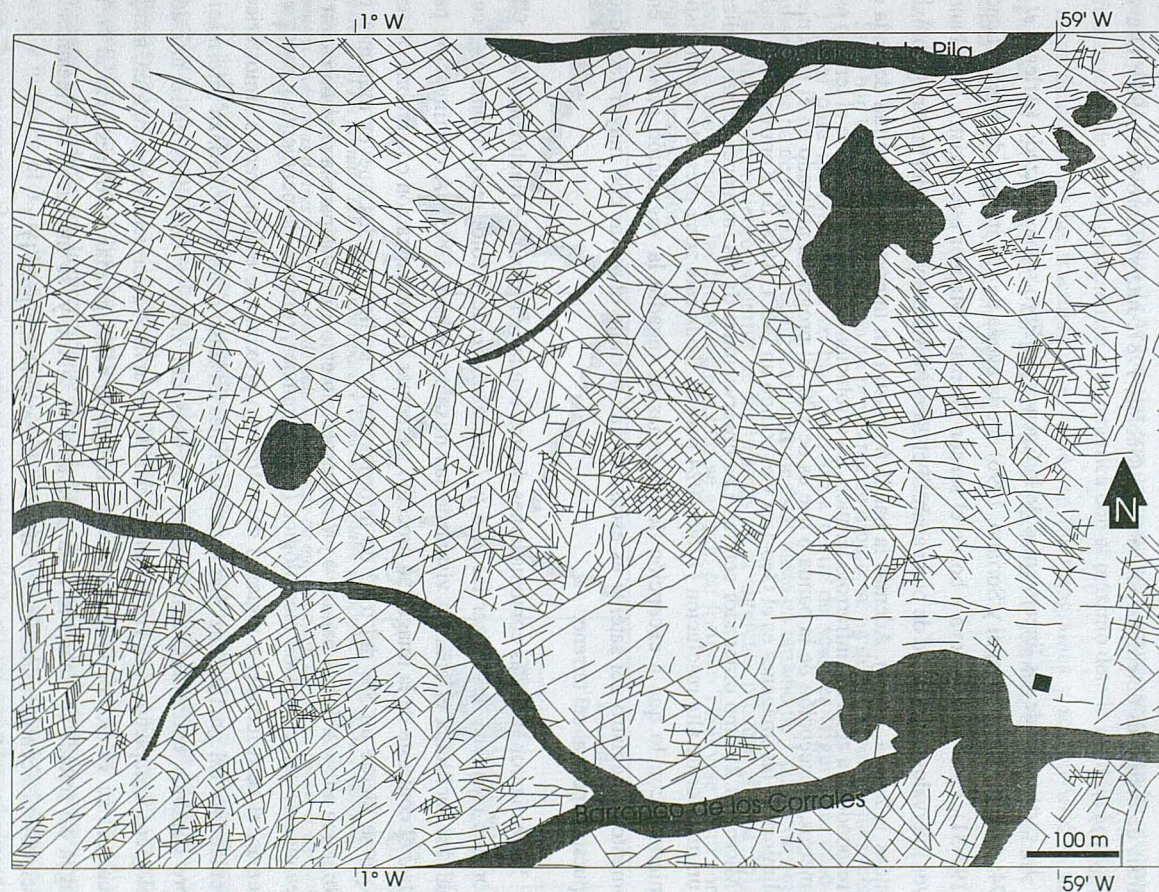


Figura 2. Localización geográfica de la zona estudiada en la Sierra de Camarena y cartografía de las fracturas.



## 2. Metodología

### 2.1. Elaboración de cartografías de lineamientos y fracturas

Los lineamientos son alineaciones fisiográficas que corresponden a fallas, fracturas o diques materializados en el propio terreno; en unos casos son identificables en campañas convencionales de investigación in situ, mientras que en otros no pueden localizarse en la superficie por un simple reconocimiento de campo. Este inconveniente se suele solucionar complementando los estudios geológicos usuales con exhaustivas cartografías o con el análisis de imágenes obtenidas por satélites (Sabins, 1987; Jutz y Chorowicz, 1993; Drury y Berhe, 1993).

La cartografía de los lineamientos de la Cuenca del Ebro se ha realizado (Arlegui *et al.*, 1994; Arlegui, 1996; Arlegui y Soriano, 1996) con la ayuda de una imagen de satélite Landsat 5 (199-31). Este satélite lleva a bordo el sensor Thematic Mapper que registra siete bandas, cuyos intervalos de longitud de onda abarcan el espectro visible y zonas del infrarrojo próximo (bandas 1, 2, 3, 4, 5 y 7). Además la banda 6 registra un intervalo de longitud de onda que corresponde a la zona del infrarrojo térmico. La resolución de todas ellas sobre el terreno es de 30 metros, a excepción de la banda 6 que es de 120. El programa utilizado en el tratamiento preliminar de las imágenes es el Geo-Jars y el equipo un IMCO 1000 de Kontron, conectado a un MicroVax 2 como ordenador central. Las observaciones de las imágenes se han realizado en un monitor de alta resolución (1280x1024 pixels). Toda esta zona presenta características semiáridas con lo que a excepción de las zonas de regadío la vegetación presente en el momento de registro del satélite es escasa lo que permite observar con mayor facilidad la respuesta espectral del terreno.

Se realizaron diversas combinaciones de tres bandas, eligiéndose finalmente la de falso color que resultaba de utilizar las 2, 4 y 7 (en azul, verde y rojo, respectivamente) cuya tonalidad facilitaba el análisis visual de las mismas (White, 1993). A continuación para realzar el contraste de la imagen se procedió a efectuar su normalización con umbral 50 (con lo que se pierde un 5% del total de información) y se llevaron los nuevos extremos del histograma a 0 y 255. Las bandas 4 y 7 son especialmente efectivas para la determinación de lineamientos con expresión morfológica (como drenajes, rupturas de pendiente y escarpes). Además, al corresponder a regiones del infrarrojo próximo se evitan efectos atmosféricos, obteniéndose así gran nitidez. Las combinaciones en falso color proporcionan información sobre cambios texturales, cambios en los usos del suelo y contactos entre unidades geológicas, completando la visión del terreno. No se aplicó la corrección geométrica, aunque se calculó su valor, por lo que todas las imágenes están giradas 9-10° respecto al N. La imagen así tratada se transfirió a un programa de dibujo y, se marcaron los lineamientos observables (reconociéndose un total de 5681 lineamientos, figura 1).



El otro mecanismo de análisis de la fracturación, y más habitual en los estudios tectónicos, es la observación y estudio de ésta en cartografías realizadas a partir de fotogramas aéreos (Razack, 1979; Grillot, 1981; Liesa, 1993). Las escalas más comunes en fotografía aérea son la 1:33000 y la 1:18000 obtenidas en los vuelos de finales de los años cincuenta, las primeras, y de los ochenta, las segundas. Sin embargo, el análisis de fracturación en la zona de Camarena de la Sierra - La Puebla de Valverde se realizó a partir de varios fotogramas aéreos 1:18.000 ampliados hasta una escala aproximada 1:4.300. El tratamiento posterior se aplicó únicamente a una parte de la misma (fotograma 590E11) con una superficie aproximada de 1.2 km<sup>2</sup> (figura 2) Al trabajar con una escala tan grande se pretendía reconocer la fracturación de escala decamétrica a kilométrica con el máximo detalle posible. Se elaboró un mapa detallado de las fracturas observables en los fotogramas y se convirtió la zona elegida de tal cartografía (con un total de 3494 fracturas) a formato digital mediante un scanner de 600 ppm de resolución (figura 2).

## 2.2. Empleo del programa de exploración automática

Si se han trazado las líneas con un programa de dibujo, se ha de seleccionar una anchura de 1 pixel para las mismas, si se han obtenido a partir de scanner (figura 3a, caso de Camarena) se ha de realizar un adelgazamiento de éstas hasta un tamaño de 1 pixel con objeto de facilitar el seguimiento posterior de las mismas en el siguiente proceso (figura 3b). El documento que contiene las líneas reconocidas se guardó en formato TIFF y se abrió con el programa de exploración.

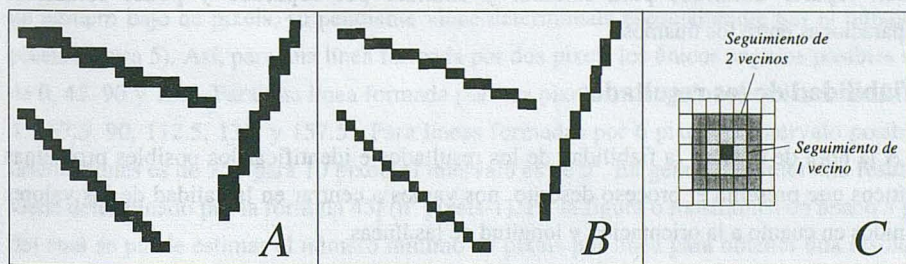


Figura 3. a) En formato TIFF una línea aparece como un conjunto de pixels, antes de la exploración se la somete un adelgazamiento. b) La misma línea adelgazada a un pixel. c) La exploración se realiza por ventanas cuadradas de tres o cinco pixels de lado dependiendo de que deseemos incluir un vecino o dos como criterio de exploración.

El análisis de orientaciones y longitudes de ambos conjuntos se realizó con un programa de exploración automática elaborado por el Centro de Tratamiento Digital de Imágenes de la Universidad de Zaragoza (figura 3c). La exploración automática se inicia en un origen de coordenadas escogido y que, en nuestro caso, es el norte geográfico pues así los resultados obtenidos coincidirán con la dirección de la falla. Esta exploración va barriendo, primero en el eje X y luego en el Y, la imagen a analizar hasta que se detiene en el primer punto de una línea. Posteriormente el programa procede al seguimiento de la misma considerando los pixels



que estén dentro de una ventana cuyo tamaño puede ser escalado. El tamaño de ventana escogido será menor cuanto menor espaciado tengan las fracturas, es decir cuanto más próximas estén unas de las otras. En nuestros ejemplos el tamaño de ventana era de 1 pixel (1 vecino) para la Cuenca del Ebro y de 2 pixels (2 vecinos) para las fracturas de la Sierra de Camarena. Una vez que en el proceso de seguimiento de una línea ningún pixel queda dentro de la ventana establecida, el programa sigue barriendo a partir del siguiente pixel del inicial de la línea anterior hasta que encuentra una nueva línea comenzando de nuevo el proceso anterior.

Este programa presenta algunos problemas de seguimientos de las líneas en los cruces entre éstas, por lo que si las cartografías analizadas presentan intersecciones entre familias de fracturas, como es el caso de las fracturas de ambos conjuntos (figuras 1 y 2), es recomendable diferenciar tantos ficheros como sean necesarios con el fin de evitar cruces entre líneas. Normalmente, el número de ficheros escogido viene determinado por el número de familias diferenciadas en un primer análisis visual de la cartografía.

El programa de seguimiento de líneas genera un fichero que proporciona, básicamente, los siguientes parámetros: las coordenadas XY del primer y último punto o pixel, su longitud en pixels, la pendiente de cada línea y la calidad del ajuste a una recta de pendiente igual a la dada. No obstante también puede obtenerse otro tipo de información como es la posición de todos los pixel que componen una línea. A partir del fichero se representan las longitudes y orientaciones de las fracturas estudiadas y se pueden hacer análisis estadísticos de los mismos. Además, teniendo en cuenta las coordenadas XY del primer y último punto de cada línea se pueden separar dominios para estudiar y analizar por separado y poder establecer comparaciones entre los mismos.

### **3. Fiabilidad de los resultados**

A la hora de evaluar la fiabilidad de los resultados e identificar los posibles problemas analíticos que presenta el proceso descrito, nos vamos a centrar en la calidad de los valores obtenidos en cuanto a la orientación y longitud de las líneas.

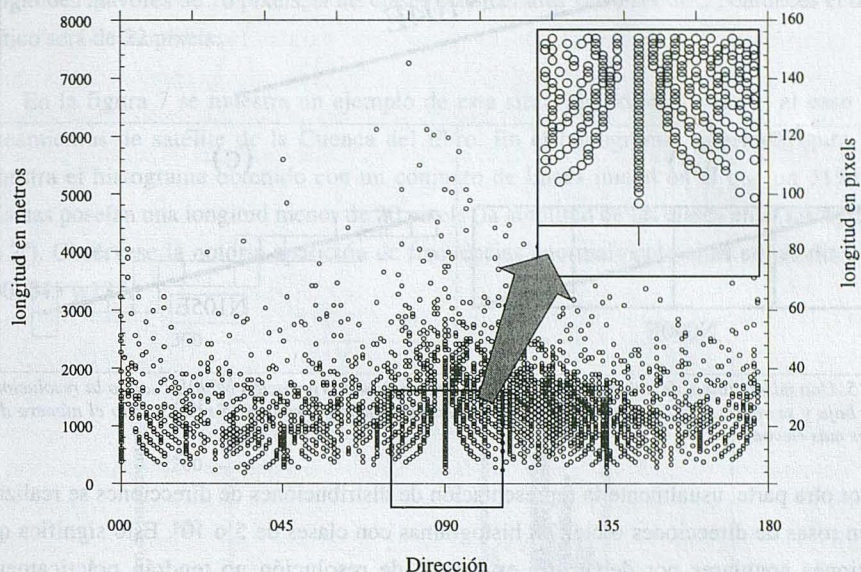
#### *3.1. El análisis de orientaciones*

En Tectónica, el análisis de orientaciones de fracturas se suele hacer representando éstas frente al número de medidas en forma de histograma de frecuencias o rosa de direcciones. Sin embargo, en cualquier estudio que tenga como base una cartografía el análisis de orientaciones de las líneas (lineamientos, fracturas,...) se hace ponderando el número de medidas con la longitud de las mismas.

Ahora bien, si representamos la longitud de los lineamientos frente a su orientación podemos encontrar una distribución anómala como la observada en la figura 4. En la parte baja de la gráfica (menor longitud), los puntos presentan una agrupación preferente en torno a



las direcciones principales 000, 045, 090 y 135. En puntos correspondientes a líneas de mayor longitud, el reparto de direcciones es más variado.



*Figura 4. Gráfico de distribución de direcciones de lineamientos en la Cuenca del Ebro frente a su longitud (un 31% de las líneas poseen una longitud menor de 20 pixels). En el área ampliada se observa con detalle cómo aparecen sectores vacíos en los que los puntos correspondientes han sido aspirados por valores de dirección cercanos.*

Esta situación se debe a que para líneas comparativamente cortas, es decir, formadas por un número bajo de pixels, su pendiente viene determinada esencialmente por el número de pixels (figura 5). Así, para una línea formada por dos pixels los únicos ángulos posibles serán de 0, 45, 90 y 135°. Para una línea formada por tres pixels los ángulos posibles serán 0, 22.5, 45, 67.5, 90, 112.5, 135, y 157.5°. Para líneas formadas por 6 pixels el intervalo posible de orientaciones es de 9° y para 10 pixels el intervalo es de 5°. En general, el intervalo resultante viene determinado por la fórmula  $45 / (n^\circ \text{ pixels} - 1)$ . En la figura 6 mostramos un ábaco a partir del cual se puede estimar el número mínimo de pixels por línea para obtener una resolución dada en las orientaciones de los lineamientos (en grados).

Para minimizar este efecto antes de ejecutar el programa se deberá tender a considerar líneas con un número de pixels mayor, es decir, deberemos aumentar la escala de trabajo tanto cuanto sea posible. En este sentido deberá tomarse en cuenta que cuanto mayor sea la imagen a tratar mayor será el número de pixels a considerar y más largo será el proceso de tratamiento en ordenador. No obstante, estos valores obtenidos por debajo del grado de resolución (en grados) deseado pueden ser desestimados en el tratamiento posterior de los resultados.



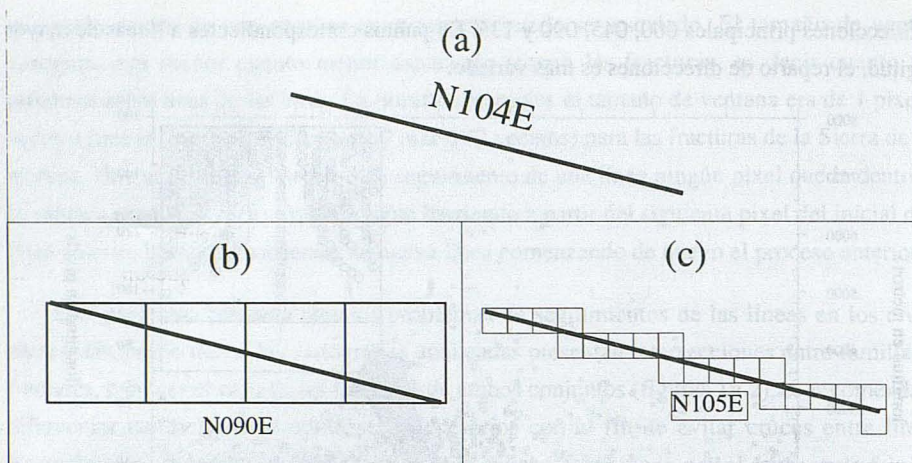


Figura 5. Una misma línea, de orientación N104E (a), presenta una orientación N090E cuando la resolución es muy baja y se representa por 5 pixels (b) y una orientación más próxima a la real cuando el número de pixels es más elevado.

Por otra parte, usualmente la representación de distribuciones de direcciones se realiza o bien en rosas de direcciones o bien en histogramas con clases de 5 o 10°. Esto significa que variaciones angulares por debajo de este nivel de resolución no tendrán prácticamente ninguna importancia.

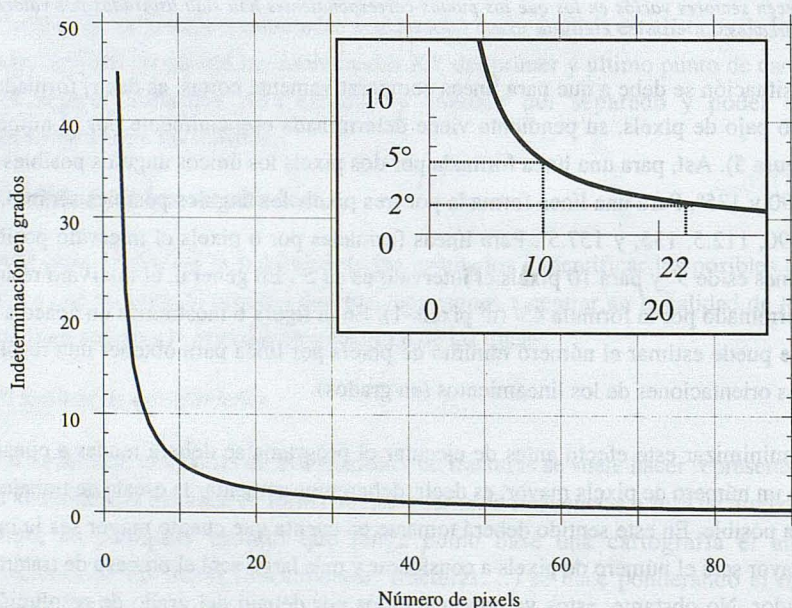


Figura 6. Ábaco con la relación entre longitud en pixels e indeterminación angular. Cuantos menos pixels contiene una línea, esta puede presentar menos valores de orientación. En el área recuadrada y ampliada vemos cómo emplear esta gráfica para determinar el número mínimo de pixels por línea dependiendo de la amplitud angular de las clases que vayamos a considerar.



En la figura 6 se incluyen dos ejemplos en este sentido. Si vamos a realizar representaciones con clases de  $10^\circ$  basta con asegurarnos de que las líneas a explorar posean longitudes mayores de 10 pixels, si las clases consideradas van a ser de  $5^\circ$ , entonces el tamaño crítico será de 22 pixels.

En la figura 7 se muestra un ejemplo de esta situación correspondiente al caso de los lineamientos de satélite de la Cuenca del Ebro. En el histograma superior (figura 7a) se muestra el histograma obtenido con un conjunto de líneas inicial en el que un 31% de las mismas poseían una longitud menor de 20 pixels (la amplitud de las clases en el histograma es de  $2^\circ$ ). Obsérvese la notoria aparición de frecuencias anormalmente altas en las direcciones 000, 045 y 135.

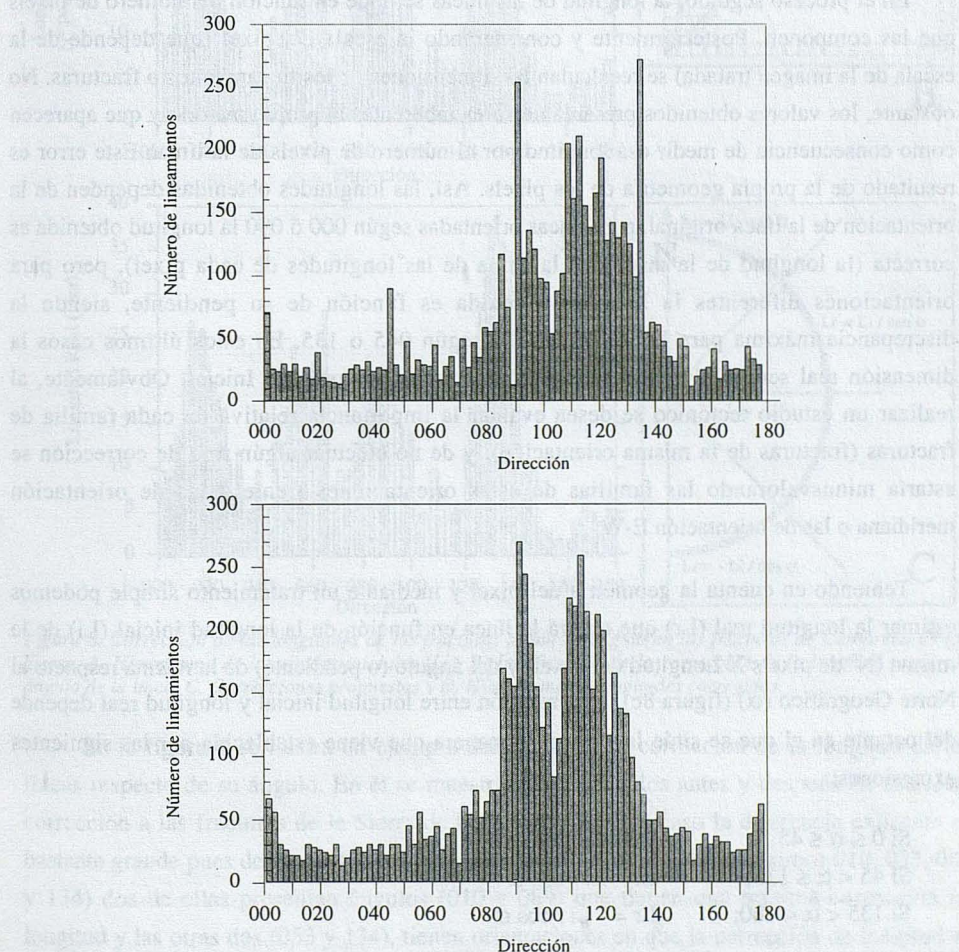


Figura 7. a) Histograma de direcciones de lineamientos en la Cuenca del Ebro a partir de un conjunto inicial de líneas de las que el 31% era menor de 20 pixels. b) Histograma de direcciones después de aumentar la escala del documento inicial de modo que el tamaño mínimo de las líneas fuese de 20 pixels. En ambos histogramas las clases son de  $2^\circ$ .



Una vez efectuado el cambio de escala en el documento de origen, asegurándonos de que el tamaño mínimo de las líneas es ahora superior a 20 pixels, y sometido de nuevo al proceso, obtenemos el histograma inferior (figura 7b). Las clases que resultaban anómalas en el gráfico anterior se han normalizado, la distribución es ahora más suave. Dado que la resolución de la imagen de satélite LANDSAT es de 30 m en las bandas combinadas (es decir, el pixel mínimo tiene de lado 30 m), eso significa que líneas por debajo de 600 m de longitud tendrán una cierta indeterminación en su dirección ya en el documento de partida, y que esa indeterminación se verá realizada en el resultado final.

### 3.2. El análisis de longitudes

En el proceso seguido, la longitud de las líneas se mide en función del número de pixels que las componen. Posteriormente y considerando la escala del pixel (que depende de la escala de la imagen tratada) se recalculan las dimensiones de los lineamientos o fracturas. No obstante, los valores obtenidos presentan errores inherentes al propio método y que aparecen como consecuencia de medir esa longitud por el número de pixels de la línea. Este error es resultado de la propia geometría de los pixels. Así, las longitudes obtenidas dependen de la orientación de la línea original, para líneas orientadas según 000 ó 090 la longitud obtenida es correcta (la longitud de la misma es la suma de las longitudes de cada pixel), pero para orientaciones diferentes la longitud obtenida es función de su pendiente, siendo la discrepancia máxima para líneas orientadas según 045 o 135. En estos últimos casos la dimensión real será  $N^\circ \text{ Pixels} / \text{sen } 45^\circ$ , es decir,  $1.41 \times \text{Longitud Inicial}$ . Obviamente, al realizar un estudio tectónico se desea evaluar la importancia relativa de cada familia de fracturas (fracturas de la misma orientación), y de no efectuar algún tipo de corrección se estaría minusvalorando las familias de estas orientaciones frente a las de orientación meridiana o las de orientación E-W.

Teniendo en cuenta la geometría del pixel y mediante un tratamiento simple podemos estimar la longitud real ( $L_r$ ) que tendrá la línea en función de la longitud inicial ( $L_i$ ) de la misma ( $N^\circ$  de pixels  $\times$  Longitud del Pixel) y del ángulo (o pendiente) de la misma respecto al Norte Geográfico ( $\alpha$ ) (figura 8c). Esta relación entre longitud inicial y longitud real depende del octante en el que se sitúe la misma de manera que viene establecida por las siguientes expresiones:

$$\begin{array}{ll} \text{Si } 0 \leq \alpha \leq 45; & L_r = L_i / \cos \alpha \\ \text{Si } 45 < \alpha \leq 135; & L_r = L_i / \text{sen } \alpha \\ \text{Si } 135 < \alpha < 180; & L_r = - L_i / \cos \alpha \end{array}$$

Esta corrección debe ser realizada a los valores obtenidos tras el tratamiento y antes de ser analizados y representados éstos. No obstante, debemos considerar que esta corrección es únicamente una aproximación más realista a la longitud de la línea, pero que existen otros



problemas que no se contemplan tanto porque creemos producen un error comparativamente mucho menor como porque también tienen peor solución. Entre estos casos podemos contemplar aquellos en los que una línea puede tener varios pixels que únicamente están cortados en parte por esa línea.

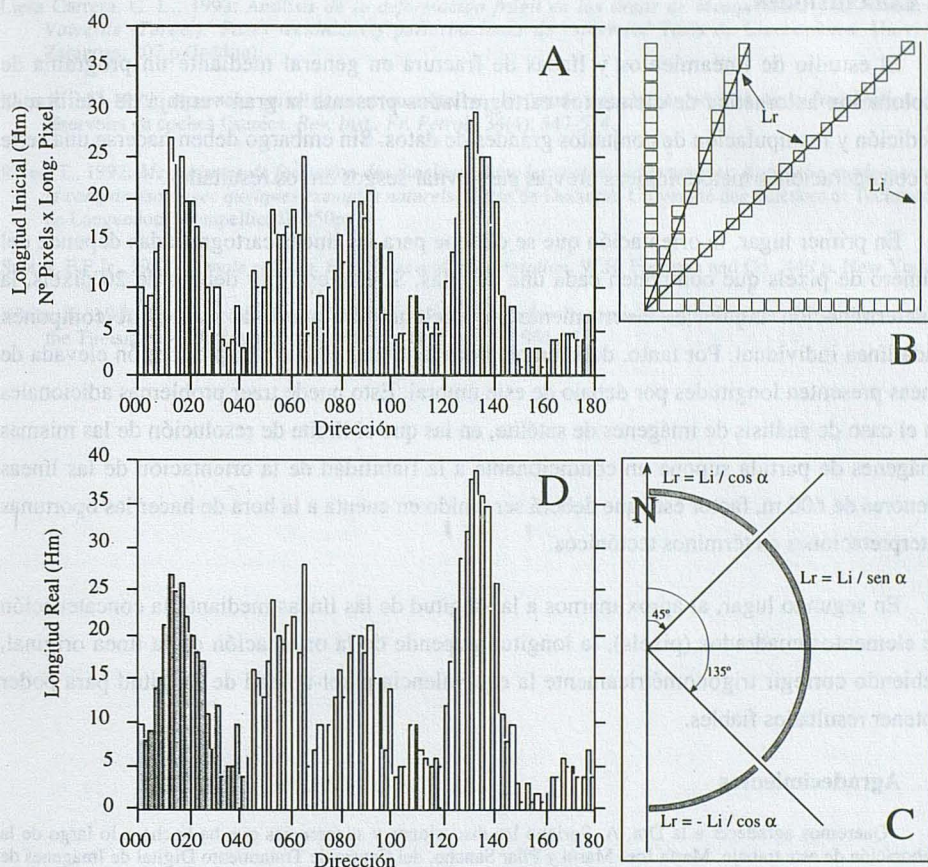


Figura 8. Corrección de las longitudes de las fracturas según su ángulo en las fracturas de Camarena de la Sierra. A. Histograma de longitudes iniciales ( $L_i$ ). B. Justificación de la corrección de la longitud según el ángulo de la línea. C. Correcciones propuestas y D. Histograma de longitudes corregidas.

En la figura 8 se ilustra un ejemplo del efecto de la corrección de la longitud de las líneas respecto de su ángulo. En él se muestran los resultados antes y después de usar esta corrección a las fracturas de la Sierra de Camarena. En este caso la diferencia existente es bastante grande pues de las cuatro familias diferenciadas en este área (máximos 010, 053, 089 y 134) dos de ellas presentan ángulos (010 y 089) que tienen una mínima corrección en longitud y las otras dos (053 y 134), tienen orientaciones en que la corrección de longitud es máxima. Con ello tenemos que antes de la corrección de longitudes los valores de longitudes medias para las distintas familias era parecido (figura 8A) mientras que después de la corrección estas longitudes medias están más diferenciadas (figura 8D) adquiriendo mayor



importancia las familias NE y NW, como era de esperar. Esto es importante puesto que normalmente las fracturas mayores son las primeras que se han formado y en este caso puede ayudar a establecer una determinada cronología entre ellas (Rives, 1992; Arlegui, 1996).

#### 4. Conclusiones

El estudio de lineamientos y líneas de fractura en general mediante un programa de exploración automática de elementos cartografiados presenta la gran ventaja de facilitar la medición y manipulación de conjuntos grandes de datos. Sin embargo deben hacerse una serie de consideraciones metodológicas previas para evitar sesgos en los resultados.

En primer lugar, la orientación que se obtiene para las líneas cartografiadas depende del número de pixels que componen cada una de ellas. Si ésta está por debajo de 20 pixels, la indeterminación angular es inversamente proporcional al número de pixels que componen cada línea individual. Por tanto, deberemos procurar evitar el que una proporción elevada de líneas presenten longitudes por debajo de este umbral. Esto puede traer problemas adicionales en el caso de análisis de imágenes de satélite, en las que el límite de resolución de las mismas imágenes de partida supone un condicionante a la fiabilidad de la orientación de las líneas menores de 600 m, factor éste que deberá ser tenido en cuenta a la hora de hacer las oportunas interpretaciones en términos tectónicos.

En segundo lugar, al aproximarnos a la longitud de las líneas mediante la concatenación de elementos cuadrados (pixels), la longitud depende de la orientación de la línea original, debiendo corregir trigonómicamente la equivalencia pixel-unidad de longitud para poder obtener resultados fiables.

#### Agradecimientos

Queremos agradecer a la Dra. A. Soriano las discusiones y sugerencias que ha hecho a lo largo de la elaboración de este trabajo. María José Marín y Pilar Sancho, del Centro de Tratamiento Digital de Imágenes de la Universidad de Zaragoza elaboraron el programa de seguimiento de líneas aquí comentado. Este trabajo ha sido financiado por el proyecto *Determinación de lineamientos a partir del análisis de imágenes de satélite*, del Programa de apoyo a la Investigación de la Universidad de Zaragoza y por el proyecto *Geomechanical modelling and anisotropy at the reservoir scale* de la Comunidad Europea, Programa JOULE II.

#### 5. Bibliografía

- Arlegui, L.E., 1996: *Diaclasas, fallas y campos de esfuerzos en el sector central de la Cuenca del Ebro*. Tesis Doctoral, Universidad de Zaragoza.
- Arlegui, L.E.; Simón, J.L. y Soriano, M.A., 1994: Un sistema regional de fracturas NW-SE en el centro de la Cuenca del Ebro. *II Congreso del Grupo Español del Terciario, Jaca, 19-21 sept.* Comunicaciones, 39-43.
- Arlegui, L.E., y Soriano, A., 1996: Lineamientos y su influencia en los modelados del centro de la Cuenca del Ebro. *IV Reunión Nacional de Geomorfología*. O Castro-Sada. La Coruña (en prensa).
- Drury, S.A. y Berhe, S.M., 1993: Accretion tectonics in northern Eritrea revealed by remotely sensed imagery. *Geol. Mag.*, **130**: 177-190.



- Grillot, J.-C., 1981: Reconnaissance des déformations cassantes à différentes échelles: Nature et essai de corrélation dans l'extrême Sud-Ouest de l'Europe (Portugal). *Rev. Inst. Fr. Pétrol.*, 36(4): 505-511.
- Jutz, S.L. y Chorowicz, J., 1993: Geological mapping and detection of oblique extensional structures in the Kenyan Rift Valley with a SPOT/LANDSAT-TM data merge. *Int. J. Remote Sensing*, 14: 1677-1688.
- Liesa Carrera, C. L., 1993: *Análisis de la deformación frágil en las áreas de Mosqueruela y la Puebla de Valverde (Teruel): Fases tectónicas y perturbaciones de esfuerzos*. Tesis de Licenciatura. Univ. de Zaragoza, 207 p (Inédita).
- Razack, M., 1979: Approche numérique et quantitative de l'étude sur clichés aériens de la fracturation des réservoirs en coches fissurées. *Rev. Inst. Fr. Pétrol.*, 34(4): 547-574.
- Rives, T., 1992: *Mécanismes de formation des diaclases dans les roches sédimentaires. Approche expérimentale et comparaison avec quelques exemples naturels*. Thèse de Doctorat, Université des Sciences et Techniques de Languedoc, Montpellier II. 250pp.
- Sabins, F.F.Jr., 1987: *Remote sensing. Principles and interpretation*. W.H. Freeman and Co., 449 p. New York.
- White, K., 1993: Image processing of Thematic Mapper data for discriminating piedmont surficial materials in the Tunisian southern Atlas. *Int. J. Remote Sensing*, 14: 961-977.



## Contenidos y distribución de Tierras Raras en las soluciones asociadas a suelos ácidos tropicales

Auqué, L.F.<sup>(1)</sup>; Gimeno, M.J.<sup>(2)</sup>; Cornieles, M.<sup>(3)</sup>;  
Valles, V.<sup>(3)</sup>; López, P.L.<sup>(1)</sup> y Mandado, J.<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> Área de Petrología y Geoquímica. Depto. Ciencias de la Tierra. Fac. Ciencias. Universidad de Zaragoza. 50009 Zaragoza (ESPAÑA).

<sup>(2)</sup> Programa de Comportamiento Ambiental de Contaminantes Convencionales. Instituto de Medio Ambiente-CIEMAT. Avenida Complutense, 22. 28006 Madrid (ESPAÑA).

<sup>(3)</sup> INRA. Unité de Science du Sol, Domaine St Paul, Site Agroparc.  
84914 Avignon Cedex 9 (FRANCE).

### Abstract

*Rare Earth Element (REE) concentrations were determined in the acidic soil solutions from Bocono watershed (Venezuela). The REE content of these waters ranges over one order of magnitude and is depleted by  $10^4$  to  $10^2$  relative to host lutitic materials. Both NASC-normalized and host lutite-normalized plots show similar patterns for all the acidic soil waters. These patterns show important Heavy REE (HREEs) enrichments with a maximum centered in the Intermediate REEs (IREEs; Eu-Tb). Enrichments of IREEs relative to Light Rare Earth Elements (LREEs) are always greater than those relative to HREEs ( $Gd_n/La_n > 30$  and  $Gd_n/Lu_n < 5$ ) and convex patterns show an asymmetrical shape.*

*Similar convex patterns are observed in other low temperature acidic systems (streams, lakes and groundwaters) but always with lower IREE/LREE ratios ( $Gd_n/La_n < 10$ ), similar HREE/LREE ratios ( $Gd_n/Lu_n < 5$ ) and, therefore, with a more symmetrical convexity. Pattern differences between the acidic soil solutions and the other acidic systems may be related to specific water-mineral interactions in the edafic environment.*

### 1. Introducción

El estudio sobre el comportamiento geoquímico de las Tierras Raras (REE) en soluciones naturales de baja temperatura está recibiendo una considerable atención en los últimos años. Como resultado de ello se dispone ya de abundante información acerca de los contenidos y pautas de distribución de estos elementos en distintos tipos de sistemas acuosos, fundamentalmente en aguas de pH neutro o alcalino (aguas marinas, subterráneas, ríos, lagos, etc; p.ej. De Baar *et al.*, 1988; Elderfield *et al.*, 1990; Möller y Bau, 1993; etc).

Los trabajos realizados en aguas ácidas naturales son, en comparación, más escasos. Sin embargo, los caracteres de este tipo de soluciones resultan especialmente adecuados para tratar algunos de los aspectos más importantes y discutidos de la geoquímica de estos elementos, tales



como: el frecuente desarrollo de pautas de distribución convexas (Auqué *et al.*, 1993; Johannesson y Lyons, 1995; Nordstrom *et al.*, 1995); su fraccionamiento durante los procesos de precipitación de fases amorfas (Auqué *et al.*, 1993; Nordstrom *et al.*, 1995); la incidencia del efecto tetrada en las pautas asociadas a fenómenos de interacción agua-mineral (Nordstrom *et al.*, 1995; Gimeno *et al.*, 1996b); o la existencia de determinados efectos competitivos en la formación de complejos de estos elementos en solución (Auqué *et al.*, 1995; Gimeno *et al.*, 1996a).

Los sistemas de aguas ácidas actualmente más estudiados se reducen a arroyos instalados en materiales con mineralizaciones de sulfuros dispersas (Auqué *et al.*, 1993; Nordstrom *et al.*, 1995), lagos con aguas de esas características (Johannesson y Lyons, 1995) y soluciones subterráneas de pH ácido (p. ej. Miekeley *et al.*, 1992; Fee *et al.*, 1992). En este trabajo se analizan los contenidos y pautas de distribución de REE en un nuevo ambiente de baja temperatura, todavía no estudiado: las soluciones asociadas a suelos hiperácidos. Y se presentan los primeros resultados obtenidos en las aguas ácidas asociadas a este tipo de suelos en Venezuela, comparándose con los de otros sistemas ácidos descritos en la bibliografía.

## 2. Localización de la zona de estudio y caracteres generales.

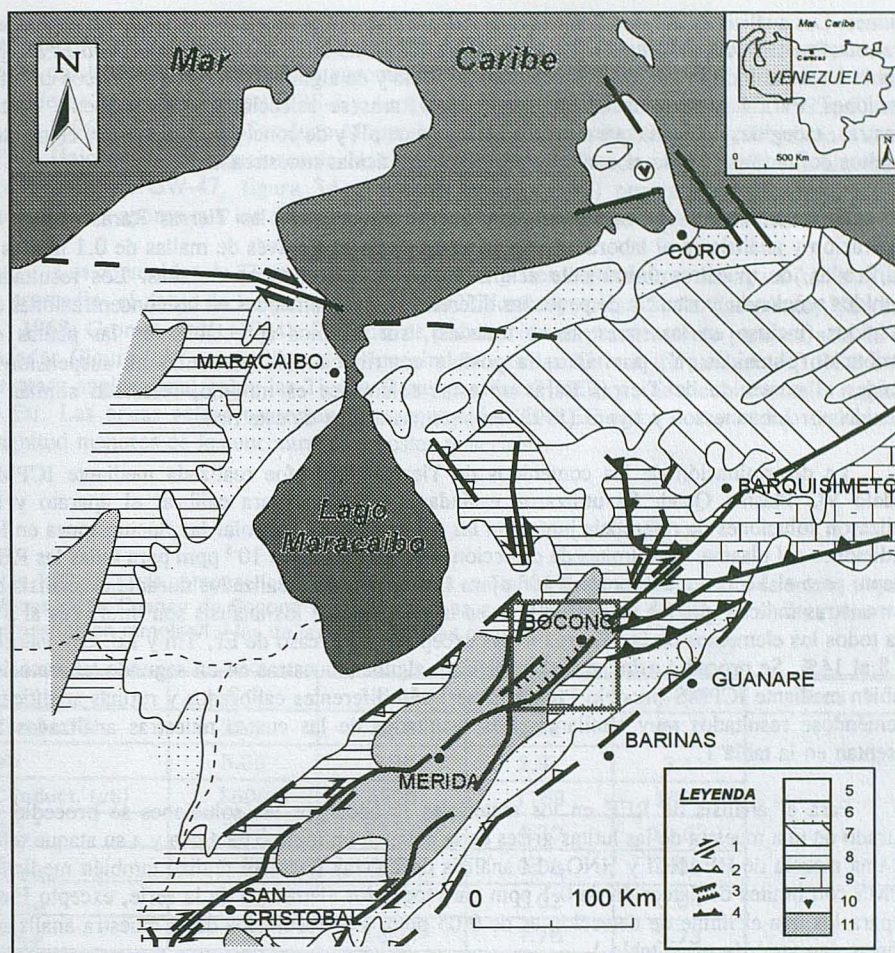
El área estudiada está situada dentro de la cuenca del río Boconó, en el extremo oriental de Venezuela (Andes venezolanos; figura 1). En esta cuenca de 1540 km<sup>2</sup> se produce un importante desarrollo de suelos hiperácidos, alineados a lo largo de la gran falla de Boconó y que afecta a una extensión total de 180 km<sup>2</sup>. Las zonas de mayor acidez se acumulan en los alrededores de la población de Niquitao, próxima a la de Boconó (figura 1), lugar en el que se localizan los suelos estudiados en este trabajo.

El material parental sobre el que se desarrollan estos suelos ácidos corresponde a lutitas grises con abundantes cristales milimétricos de sulfuros. La oxidación de estos sulfuros dispersos es el mecanismo responsable de la formación de este tipo de suelos hiperácidos, generando soluciones de pH inferior a 3 donde la acidificación es más intensa y con valores próximos a 5 en la periferia de estas zonas hiperácidas (Cornieles y Vallès, 1995).

La capacidad de movilización de aluminio y hierro de estas soluciones ácidas tiene que ser considerablemente elevada. Frecuentemente se observa la formación de fases amorfas sulfatado-alumínicas (inducida por procesos de concentración evaporativa) y la precipitación de oxihidróxidos férricos (debida a procesos de oxidación del hierro disuelto) en la superficie de estos suelos y en las zonas de encharcamiento de agua (Cornieles y Vallès, 1995). Por otro lado, las aguas alcalinas procedentes de la parte alta del paisaje de la cuenca del Boconó se mezclan localmente con las aguas ácidas de los suelos provocando de nuevo la precipitación de fases amorfas alumínico-sulfatadas y de oxihidróxidos férricos, en un proceso muy similar al descrito por Auqué *et al.* (1993) en el Arroyo del Val (España).

Estos caracteres químicos provocan la casi total deforestación de esas zonas, a pesar de que el clima tropical favorece la producción de una biomasa elevada. La ausencia de cobertera vegetal favorece, a su vez, la erosión de las capas superficiales ya lavadas y menos ácidas, que son desmontadas por las lluvias tropicales provocando la exposición subaérea de las lutitas parentales con sulfuros frescos. Este proceso autoalimentado evita el desarrollo de un perfil edáfico definido y provoca que los materiales responsables del proceso de acidificación se encuentren siempre próximos a la superficie, impidiendo el desarrollo de la vegetación.





**Figura 1.** Situación y esquema geológico simplificado de la zona estudiada (leyenda: 1. Falla activa. 2. Falla inversa. 3. Fosa tectónica. 4. Cabalgamiento. 5. Cuaternario. 6. Mioceno-Plioceno. 7. Oligoceno-Mioceno. 8. Mesozoico-Terciario. 9. Materiales del Cretácico (sedimentarios y volcánicos). 10. Complejo ofiolítico. 11. Precámbrico-Paleozoico).

### 3. Metodología

Las aguas ácidas utilizadas en este trabajo fueron tomadas en una campaña más amplia, no restringida únicamente a soluciones de estas características químicas, que abarcaba el desmuestre de distintos tipos de soluciones superficiales de la cuenca del Boconó. Las muestras de agua en los suelos ácidos corresponden a escorrentías de circulación hipodérmica tomadas directamente en zonas de rezume.

Se determinaron *in situ* la temperatura, pH y conductividad de las soluciones, tomándose en cada punto de muestreo dos alícuotas, una para el análisis de aniones y otra para el de



cationes. Los análisis de aniones fueron realizados mediante Análisis Iónico Capilar en un aparato de electroforesis modelo Waters y los de cationes mediante ICP, modelo Jovin-Yvon JY24. En la tabla 1 sólo se indican las concentraciones de sulfato y de algunos elementos metálicos en estas soluciones. Para la determinación de las Tierras Raras se seleccionaron inicialmente cuatro muestras, escogidas de forma que cubrieran el rango de pH y de concentración total de elementos disueltos definido para todo el conjunto de soluciones ácidas muestreadas.

El tratamiento de las muestras para la determinación de las Tierras Raras incluyó la preparación y análisis en el laboratorio de alícuotas filtradas a través de mallas de 0.1 micras y acidificadas, de muestras únicamente acidificadas y de muestras no tratadas. Los resultados obtenidos señalan la existencia de pequeñas diferencias no sistemáticas en las concentraciones de lantánidos (incluso en las muestras no tratadas), sin cambios apreciables en las pautas de distribución obtenidas. Y, por tanto, la posible contribución de partículas en suspensión y coloides al contenido de Tierras Raras en estas soluciones es mínimo, resultado similar al obtenido por Johannesson y Lyons (1995) en sistemas ácidos de este tipo.

La determinación de los contenidos de Tierras Raras fue realizada mediante ICPMS modelo VG Plasma Quad. Se utilizaron estándares sintéticos para calibrar el aparato y se analizaron soluciones de referencia junto con las muestras para controlar las fluctuaciones en las condiciones del plasma. Los límites de detección del aparato son de  $10^{-5}$  ppm para todas las REE excepto para el Lu con un valor de  $5 \cdot 10^{-6}$  ppm. Los duplicados realizados durante el análisis de las muestras indican que las incertidumbres en la precisión de los análisis son inferiores al 5% para todos los elementos de las Tierras Raras excepto para el caso de Er, Tm y Lu, con valores del 8 al 14%. Se procedió asimismo al análisis de algunas muestras en un segundo laboratorio, también mediante ICPMS (modelo Perkin-Elmer) con diferentes calibrados y rutinas analíticas, obteniéndose resultados muy similares. Los resultados de las cuatro muestras analizadas se presentan en la tabla 1.

Para el análisis de REE en los materiales lavados por las soluciones se procedió al triturado de una muestra de las lutitas grises de la zona en un molino de ágata y a su ataque total con una mezcla de HF, HCl y HNO<sub>3</sub>. El análisis de Tierras Raras se realizó también mediante ICPMS con límites de detección de 0.1 ppm para todos los elementos de la serie, excepto Eu y Lu para los que el límite de detección es de 0.05 ppm. Los resultados de la muestra analizada se presentan también en la tabla 1.

#### 4. Caracteres geoquímicos y contenidos de Tierras Raras en el sistema

Las soluciones analizadas presentan los rasgos composicionales característicos de las aguas ácidas de lavado de minas, es decir, valores de pH bajos (entre 2.3 y 3.35; tabla 1), sulfato como anión dominante y muy elevados contenidos de elementos metálicos disueltos (en la tabla 1 se muestran las concentraciones de Fe, Al y Zn). La distinta intensidad del proceso de acidificación (oxidación de los sulfuros dispersos en los materiales drenados) es la responsable de las amplias variaciones detectadas en los contenidos de sulfato y elementos metálicos de estas aguas ácidas, especialmente elevados en la muestra C-5, la de pH más bajo de todas las analizadas (tabla 1). Resulta destacable la presencia de elevadas concentraciones de aluminio en estas soluciones como responsable de los ya mencionados efectos fitotóxicos en estos suelos.

Como en otros sistemas de aguas ácidas (Auqué *et al.*, 1993, 1994; Gimeno *et al.*, 1996a), los contenidos de Tierras Raras en estas soluciones son muy elevados, con concentraciones totales ( $\Sigma$ REE) de 0.113 a 1.24 ppm (tabla 2). Estos valores son superiores en tres o cuatro órdenes de



magnitud a los determinados en aguas marinas o en cursos superficiales de carácter neutro-básico y sólo resultan parangonables a los encontrados en arroyos ácidos naturales como los de la zona de Bádenas en España (muestra BS-3 y Arroyo del Val, figura 3A; Auqué *et al.*, 1993; Gimeno *et al.*, 1996a) o los de las San Juan Mountains en USA (muestra 90WA111, Nordstrom *et al.*, 1995). Únicamente las soluciones ácidas subterráneas de la mina de uranio de Osamu-Utsumi en Brasil (muestra GW-47, figura 3A; Miekeley *et al.*, 1992) presentan contenidos en REE ligeramente mayores que los detectados en las aguas de los suelos ácidos venezolanos.

Los contenidos de Tierras Raras en las lutitas grises lixiviadas por las aguas (tabla 1) son, en promedio, el doble de los presentes en NASC (North American Shale Composite; Haskin *et al.*, 1968; Gromet *et al.*, 1984). Su pauta de distribución es prácticamente paralela a la de ese estándar (figura 2A) con un ligero enriquecimiento en las Tierras Raras ligeras (LREE en la literatura anglosajona) sobre las Tierras Raras pesadas (HREE) y una cierta anomalía negativa en Eu. Las aguas ácidas presentan unos contenidos de REE entre dos y cuatro órdenes de magnitud menores de los encontrados en estos materiales.

Tabla 1: Caracteres composicionales y contenidos en Tierras Raras en las soluciones ácidas y rocas lutíticas de la Cuenca de Boconó (Venezuela). Las concentraciones de  $\text{SO}_4^{2-}$ , Fe, Zn y Al están expresadas en mmoles/l y las de las Tierras Raras en ppm.

	C-1	C-5	C-10	C-14	Roca
Temp. (°C)	22.7	22.8	20.5	21.1	
pH	3.35	2.30	2.97	3.1	
Conduct. ( $\mu\text{S}$ )	1600	4920	1169	1600	
$\text{SO}_4^{2-}$	7.89	58.46	4.30	10.03	
$\text{Fe}_{\text{Total}}$	0.03	9.35	0.08	0.08	
$\text{Zn}_{\text{Total}}$	0.05	0.15	0.02	0.04	
$\text{Al}_{\text{Total}}$	2.61	16.71	1.76	3.73	
Contenidos en Tierras Raras					
La	$6.61 \cdot 10^{-3}$	$2.07 \cdot 10^{-2}$	$2.50 \cdot 10^{-3}$	$1.28 \cdot 10^{-2}$	78.90
Ce	$2.22 \cdot 10^{-2}$	$1.04 \cdot 10^{-1}$	$7.14 \cdot 10^{-3}$	$5.18 \cdot 10^{-2}$	160.00
Pr	$4.26 \cdot 10^{-3}$	$2.14 \cdot 10^{-2}$	$1.57 \cdot 10^{-3}$	$1.09 \cdot 10^{-2}$	18.70
Nd	$2.91 \cdot 10^{-2}$	$1.49 \cdot 10^{-1}$	$1.17 \cdot 10^{-2}$	$7.17 \cdot 10^{-2}$	65.90
Sm	$1.80 \cdot 10^{-2}$	$1.12 \cdot 10^{-1}$	$7.65 \cdot 10^{-3}$	$3.71 \cdot 10^{-2}$	11.00
Eu	$4.74 \cdot 10^{-3}$	$3.16 \cdot 10^{-2}$	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$9.09 \cdot 10^{-3}$	1.42
Gd	$3.41 \cdot 10^{-2}$	$1.81 \cdot 10^{-1}$	$1.39 \cdot 10^{-2}$	$4.84 \cdot 10^{-2}$	8.10
Tb	$5.11 \cdot 10^{-3}$	$2.74 \cdot 10^{-2}$	$2.13 \cdot 10^{-3}$	$8.36 \cdot 10^{-3}$	1.30
Dy	$2.57 \cdot 10^{-2}$	$1.26 \cdot 10^{-1}$	$1.11 \cdot 10^{-2}$	$4.16 \cdot 10^{-2}$	8.40
Ho	$4.25 \cdot 10^{-3}$	$1.94 \cdot 10^{-2}$	$1.82 \cdot 10^{-3}$	$7.12 \cdot 10^{-2}$	1.72
Er	$9.52 \cdot 10^{-3}$	$4.38 \cdot 10^{-2}$	$4.22 \cdot 10^{-3}$	$1.61 \cdot 10^{-2}$	5.20
Tm	$1.17 \cdot 10^{-3}$	$5.49 \cdot 10^{-3}$	$5.18 \cdot 10^{-4}$	$1.82 \cdot 10^{-3}$	0.80
Yb	$5.82 \cdot 10^{-3}$	$2.82 \cdot 10^{-2}$	$2.58 \cdot 10^{-3}$	$9.67 \cdot 10^{-3}$	5.80
Lu	$7.70 \cdot 10^{-4}$	$3.56 \cdot 10^{-3}$	$3.70 \cdot 10^{-4}$	$2.70 \cdot 10^{-4}$	0.88



La concentración total de REE de las aguas ácidas venezolanas se encuentra directamente relacionada con el grado de acidez y, a grandes rasgos, sus valores aumentan al disminuir el pH y al aumentar la concentración de sulfato de las soluciones. El sulfato es el único ligando activo que forma complejos con los lantánidos en aguas ácidas naturales (Auqué *et al.*, 1994; Gimeno *et al.*, 1995, 1996a) y, por tanto, la transferencia de REE en los procesos de interacción agua-roca se va a ver favorecida en las soluciones con mayor capacidad de formar complejos con esos elementos.

## 5. Pautas de distribución de las REE en las soluciones ácidas

Las pautas de distribución de las Tierras Raras en las aguas ácidas de Venezuela normalizadas frente a NASC se han representado en la figura 2A. La normalización respecto a los contenidos de la roca lutítica en contacto con las soluciones (figura 2B) no introduce ninguna modificación en la pautas observadas, motivo por el que la descripción que sigue a continuación se referirá a los resultados normalizados frente a NASC.

Todas las aguas analizadas muestran, globalmente, un enriquecimiento en las Tierras Raras pesadas (HREE) respecto a las ligeras (LREE) con relaciones normalizadas de Lu frente a La ( $Lu_n/La_n$ ) entre 5 y 12 (tabla 2). Pero lo más destacable en estas pautas es la existencia de un enriquecimiento relativo en las Tierras Raras intermedias (IREE; Eu, Gd y Tb) respecto al resto de los lantánidos.

La anomalía de IREE se traduce en el desarrollo de una morfología convexa en las pautas de las Tierras Raras en solución, con enriquecimientos en los lantánidos más pesados desde La a Gd y empobrecimientos, también respecto a los más pesados, desde Gd a Lu. Esta morfología convexa no es simétrica y las pendientes de las trazas de Gd-La y Gd-Lu son marcadamente distintas: las relaciones normalizadas ( $Gd_n/La_n$ ) presentan valores superiores a 23 mientras que las relaciones ( $Gd_n/Lu_n$ ) presentan valores inferiores a 5 (tabla 2). O lo que es lo mismo, el empobrecimiento en LREE es mucho más marcado que el de las HREE, ambas respecto a IREE.

En las figuras 3 A y B se muestran comparativamente las pautas de las soluciones edáficas respecto a las de otras soluciones ácidas naturales. Como puede apreciarse tanto la morfología convexa como las demás características señaladas para la distribución de REE en las soluciones estudiadas son análogas a las encontradas en las soluciones ácidas de arroyos (Auqué *et al.*, 1993, 1994; Gimeno *et al.*, 1995; Nordstrom *et al.*, 1995) y lagos (Johannesson y Lyons, 1995).

**Tabla 2:** Parámetros y relaciones de interés para los contenidos en Tierras Raras de las soluciones ácidas de Venezuela. El contenido total de REE ( $\Sigma$ REE) está expresado en ppm y las relaciones presentadas corresponden a los valores normalizados frente a NASC de los elementos en cuestión.

	C-1	C-5	C-10	C-14
$\Sigma$ REE	0.2953	1.2396	0.1126	0.4882
$Lu_n/La_n$	7.77	11.46	9.87	5.05
$Gd_n/La_n$	31.75	53.81	34.21	23.25
$Gd_n/Lu_n$	4.09	4.69	3.47	4.60



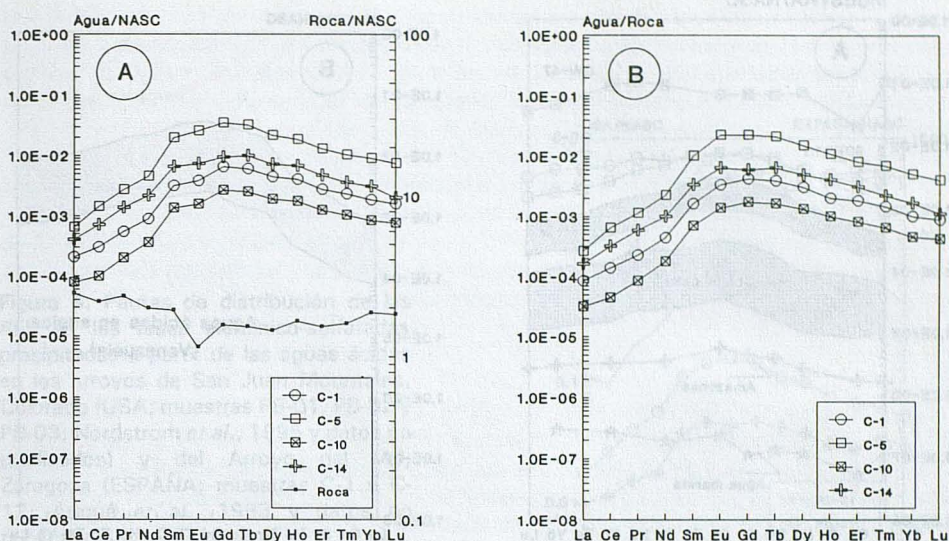


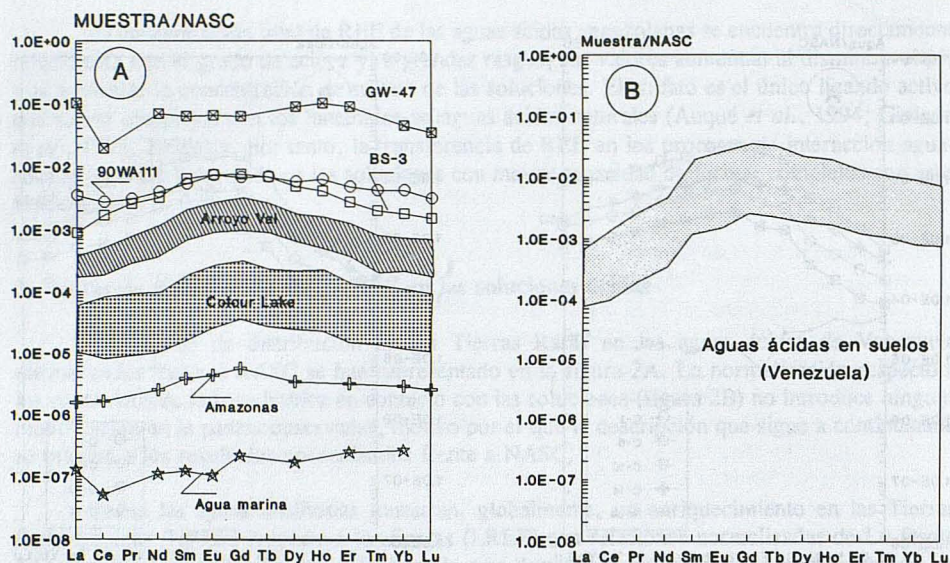
Figura 2. Pautas de distribución de las Tierras Raras en: A.- las soluciones ácidas y roca lutítica en contacto con ellas, normalizadas frente a NASC. B.- las soluciones ácidas normalizadas frente a la roca lutítica en contacto.

No obstante, aunque los rasgos genéricos son similares, existen diferencias en la intensidad con la que aparecen algunos de ellos en las soluciones edáficas. De esta forma, el enriquecimiento en HREE respecto a LREE de esas soluciones es mucho más marcado que en cualquiera de las aguas ácidas presentadas en la figura 3A y cuya relación normalizada  $Lu_n/La_n$  no supera el valor de 2.5 (recuérdese que en el caso de las soluciones edáficas los valores de esta relación se situán entre 5 y 12; tabla 2).

Por otro lado, la traza que va de Gd a Lu en la pauta de distribución presenta pendientes muy parecidas a la de los otros sistema ácidos (todos ellos con valores de la relación  $Gd_n/Lu_n$  menores de 5) pero la que va de La a Gd presenta pendientes claramente distintas, más marcada en las aguas de Venezuela. Las relaciones  $Gd_n/La_n$  de esas soluciones son superiores a 23 (tabla 2) mientras que las encontradas en las aguas ácidas de otros sistemas (figura 3A) son inferiores a 10. De esta forma, el empobrecimiento en LREE respecto a las IREE que caracteriza esta parte de la pauta convexa de las soluciones ácidas es mucho más marcado en las aguas venezolanas.

Independientemente de estos caracteres particulares, la distribución convexa de REE en las aguas ácidas de Boconó presenta marcadas diferencias respecto a la de los contenidos totales de estos elementos en las rocas lutíticas en contacto (o respecto a NASC; figura 2). Y, como ocurre en otros sistemas ácidos naturales generados por idénticos mecanismos de oxidación de sulfuros (Auqué *et al.*, 1994; Johannesson y Lyons, 1995; Gimeno *et al.*, 1995), las pautas convexas no parecen ser el resultado de una transferencia directa de la pauta asociada a la roca en contacto con las soluciones.





**Figura 3.** Comparación de las pautas de distribución de Tierras Raras en distintos tipos de soluciones. A.- Pautas de distribución en agua de mar (Elderfield y Greaves, 1982), agua de río (Elderfield *et al.*, 1990), aguas ácidas de Colour Lake (Canadá; Johannesson y Lyons, 1995), aguas ácidas de la zona de Bádenas (España; Arroyo del Val y muestra BS-3, Auqué *et al.*, 1994; Gimeno *et al.*, 1996a), aguas ácidas de San Juan Mountains (muestra 90WA111; Nordstrom *et al.*, 1995) y soluciones ácidas de la mina de uranio de Osamu-Utsumi (Brasil, muestra GW-47; Miekeley *et al.*, 1992). B.- Rango en la pauta de distribución en las aguas ácidas de Venezuela, definido por las muestras de mayor y menor concentración de Tierras Raras (C-5 y C-10, respectivamente).

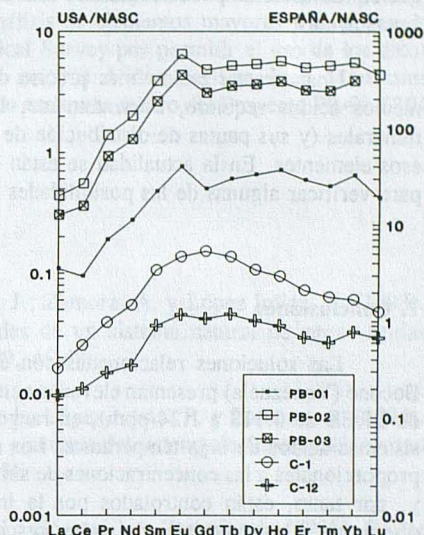
## 6. Discusión de resultados

Las reacciones de formación de complejos de las REE en soluciones ácidas están dominadas por el sulfato, anión que no produce fenómenos de fraccionamiento apreciables a lo largo de la serie de las REE (ver por ej. Gimeno *et al.*, 1996a) y que, por tanto, no puede justificar la aparición de este tipo de pautas convexas. En otros sistemas ácidos, la presencia de este tipo de pautas enriquecidas en IREE se ha relacionado con procesos específicos de interacción agua-mineral, fundamentalmente respecto a oxihidróxidos de Fe y Mn.

Gosselin *et al.* (1992) señalan la presencia de pautas convexas de distribución de REE en las salmueras subterráneas que estudian, encontrando pautas similares asociadas a óxidos y oxihidróxidos de Fe y Mn, carbonatos arcillosos y minerales de relleno de fracturas (calcitas férricas y piritas) en los materiales del acuífero. Y sugieren, que las pautas enriquecidas en IREE de las aguas proceden de procesos específicos de interacción (disolución, intercambio iónico o procesos de adsorción/desorción) con estas fases. Una génesis similar, referida más específicamente a la disolución de óxidos y oxihidróxidos de Fe y Mn es la propuesta por Johannesson y Lyons (1995) para las aguas ácidas de Colour Lake (figura 3A).



**Figura 4.** Pautas de distribución de las REE en las fases aluminico-sulfatadas precipitadas a partir de las aguas ácidas en los arroyos de San Juan Mountains, Colorado (USA; muestras PB-01, PB-02 y PB-03; Nordstrom *et al.*, 1995 y datos no publicados) y del Arroyo del Val, Zaragoza (ESPAÑA; muestras C-1 y C-12; Auqué *et al.*, 1993 y datos no publicados).



Los óxidos y oxihidróxidos de Fe y Mn son fases que tapizan frecuentemente las partículas sedimentarias de rocas lutíticas como las drenadas por las aguas ácidas de Venezuela y, de hecho, se ha verificado la presencia de oxihidróxidos secundarios en estos materiales (Corneiles y Vallès, 1995). Estas fases se disuelven fácilmente en contacto con soluciones de pH ácido con lo que, comparativamente, podrían ser consideradas como las responsables de las pautas convexas también en las soluciones de Boconó. Las diferencias en la morfología convexa de estas aguas vendrían heredadas de las existentes en los oxihidróxidos de este ambiente edáfico, si se considera que el tipo de interacción establecida es simplemente de disolución (tal y como sugieren Johannesson y Lyons, 1995).

No obstante, los caracteres del medio edáfico (con bajas relaciones agua/roca) sugieren la existencia de interacciones más complejas entre las soluciones y los materiales drenados, haciendo factible la intervención de otras fases minerales y no únicamente a través de procesos de disolución. Gosselin *et al.* (1992) observan, por ejemplo, modificaciones en las pautas convexas de sus aguas subterráneas según la litología en contacto con las mismas, haciendo factible que las diferencias en las pautas de las aguas ácidas de Venezuela sean consecuencia de la intervención de otras fases (aparte de los oxihidróxidos de Fe-Mn), y de procesos más complejos que el de disolución mineral. La formación de fases secundarias enriquecidas en LREE ha sido citada en estudios de meteorización como uno de los controles en la movilización de las REE (p. ej. Banfield y Eggleton, 1989); y la precipitación de este tipo de fases podría resaltar, evidentemente, el empobrecimiento de LREE respecto a IREE en soluciones que tuvieran ya una pauta convexa de distribución, favoreciendo la aparición de morfologías como las de Boconó.



Por otro lado, durante la evolución de los suelos hiperácidos estudiados aparecen fases amorfas aluminico-sulfatadas similares a las encontradas en otros sistemas de aguas ácidas. Las pautas de distribución de las REE en estas fases presentan morfologías muy similares a las de las soluciones edáficas venezolanas (figura 4; Auqué *et al.*, 1993; Nordstrom *et al.*, 1995) con lo que su redisolución puede contribuir también al desarrollo de este tipo de pautas convexas en las aguas ácidas.

Una caracterización más precisa del origen de estas pautas convexas de las REE en medios ácidos requiere, evidentemente, la realización de estudios más detallados sobre los minerales (y sus pautas de distribución de REE) específicamente involucrados en el control de esos elementos. En la actualidad se están continuando los trabajos en distintos sistemas ácidos para verificar algunas de las posibilidades mencionadas.

## 7. Conclusiones

Las soluciones relacionadas con el desarrollo de suelos hiperácidos en la cuenca del Boconó (Venezuela) presentan elevadas concentraciones de Tierras Raras en solución (con valores de  $\Sigma\text{REE}$  de 0.113 a 1.24 ppm), en rangos únicamente comparables a los detectados en otros sistemas ácidos de baja temperatura. Los contenidos totales de Tierras Raras son directamente proporcionales a las concentraciones de sulfato e inversamente proporcionales al pH de las aguas y, por tanto, están controlados por la intensidad del proceso de oxidación de los sulfuros dispersos en los materiales drenados, responsable del fenómeno de acidificación.

Las pautas de distribución de las Tierras Raras, normalizadas respecto a NASC o respecto a las lutitas en contacto con las soluciones, presentan marcados enriquecimientos de HREE respecto a LREE, con relaciones  $(\text{Lu}_n/\text{La}_n) \gg 1$ . Pero lo más llamativo es el desarrollo de morfologías convexas caracterizadas por enriquecimientos de IREE respecto al resto de Tierras Raras. Este modelo de distribución es cualitativamente análogo al encontrado en otros sistemas ácidos superficiales de baja temperatura (lagos, arroyos). Sin embargo el modelo obtenido en las aguas ácidas de Venezuela presenta caracteres cuantitativos específicos, todavía no descritos en la literatura sobre el tema. De esta forma, las morfologías convexas obtenidas no son simétricas respecto a las IREE como sucede en otros sistemas ácidos, con relaciones  $\text{Gd}_n/\text{La}_n$  considerablemente más elevadas.

Los procesos de formación de complejos de REE en este tipo de soluciones ácidas no pueden producir los procesos de fraccionamiento de las REE necesarios para justificar este tipo de pautas convexas. El desarrollo de estas morfologías todavía no está firmemente establecido, pero tiene que estar condicionado por procesos específicos de interacción agua-mineral con determinadas fases de los materiales drenados, como óxidos y oxihidróxidos de hierro o fases amorfas aluminico-sulfatadas.

Los caracteres particulares encontrados en las pautas convexas de las soluciones ácidas estudiadas pueden estar relacionados, por tanto, con diferencias en las pautas de los minerales específicamente lixiviados en los materiales drenados o con la intervención de mecanismos más complejos (intercambio iónico, procesos de adsorción/desorción, precipitación de fases secundarias), favorecidos por las bajas relaciones agua/roca del ambiente edáfico, en el control de las REE en solución.



## Agradecimientos

Queremos expresar nuestro agradecimiento por su colaboración en la realización de los análisis de Tierras Raras a Bernard Reynier del Laboratoire de Géochimie del CNRS en Toulouse, y a Alain Aventurier de la Unité de Recherches et analyses del CIRAD (Montpellier) por su inestimable ayuda en la realización de los análisis de elementos mayores y menores. Y asimismo, al Dr. D.K. Nordstrom del U.S. Geological Survey por permitir el uso de los datos de REE de las fases aluminico-sulfatadas de los arroyos ácidos de San Juan Mountains (Colorado), todavía no publicados. Este trabajo ha sido realizado dentro del Proyecto PB-93-0304 de la DGICYT.

## Bibliografía

Auqué, L.F.; Tena, J.M.; Gimeno, M.J.; Mandado, J.; Zamora, A. y López Julián, P. (1993). Distribución de tierras raras en soluciones y coloides de un sistema natural de aguas ácidas (Arroyo del Val, Zaragoza). *Estudios Geológicos*, 49, 41-48.

Auqué, L.F.; Tena, J.M.; Gimeno, M.J.; Mandado, J.; López Julián, P. y Zamora, A. (1994). Especiación de Tierras Raras en las soluciones ácidas y neutras del sistema de drenaje del Arroyo del Val (Zaragoza). *Estudios Geológicos*, 50, 179-188.

Auqué, L.F.; López, P.; Gimeno, M.J.; Mandado, J.; Gómez, J. y Zamora, A. (1995). Pautas de especiación de las Tierras Raras en las soluciones ácidas de Osamu-Utsumi, Poços de Caldas (Brasil). *Rev. Acad. Ciencias Zaragoza*, 50, 145-154.

Banfield, J.F. y Eggleton, R.A. (1989). Apatite replacement and rare earth mobilization, fractionation, and fixation during weathering. *Clays and Clay Minerals*, 37, 113-127.

Cornieles, M. y Vallès, V. (1995). Effects de la production d'acidité par oxidation de pyrite sur la vegetation et l'érosion dans le bassin versant du rio Bocono (Andes venezueliennes). *Comptes Rendus du GRESSAP-ORSTOM*, Montpellier, 12 Septembre, 1995. pp. 11-16.

De Baar, H.J.W.; German, C.R.; Elderfield, H. y Van Gaans (1988). Rare earth element distributions in anoxic waters of the Cariaco Trench. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 52, 1203-1220.

Elderfield, H. y Greaves, M.J. (1982). The rare earth elements in seawater. *Nature*, 296, 214-219.

Elderfield, H.; Upstill-Goddard, R. y Sholkovitz, E.R. (1990). The rare earth elements in rivers, estuaries and coastal seas and their significance to the composition of ocean waters. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 54, 971-991.

Fee, J.A.; Gaudette, H.E.; Lyons, W.B. y Long, D.T. (1992). Rare-earth element distribution in Lake Tyrrell groundwaters, Victoria, Australia. *Chem. Geol.*, 96, 67-93.

Gimeno, M.J.; Auqué, L.F.; López, P. y Mandado, J. (1995). Rare earth element aqueous speciation in the acidic and neutral solutions of the "Arroyo del Val" system, Iberian Chain, Spain. *MIGRATION'95*, Abstracts, pág. 97. Saint-Malo, France. September 10-15, 1995.



Gimeno, M.J.; Auqué, L.F.; López, P.; Gómez, J. y Mandado, J. (1996a). Pautas de distribución de especies de las Tierras Raras en soluciones ácidas naturales. *Estudios Geológicos*, 52, 11-22.

Gimeno, M.J.; Auqué, L.F.; Nordstrom, D.K. y Bruno, J. (1996b). Rare earth element (REE) geochemistry and the tetrad effect in the naturally acidic waters of Arroyo del Val, Northeastern Spain. Geological Society of America. 1996 Annual Meeting. Denver, CO. Abstracts with Programs (en prensa).

Gosselin, D.C.; Smith, M.R.; Lepel, E.A. y Laul, J.C. (1992). Rare earth elements in chloride-rich groundwater, Palo Duro Basin, Texas, USA. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 56, 1495-1505.

Gromet, L.P.; Dymek, R.F.; Haskin, L.A. y Korotev, R.L. (1984). The "North American Shale Composite": its compilation, major and trace element characteristics. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 48, 2469-2482.

Haskin, L.A.; Haskin, M.A.; Frey, F.A. y Wildeman, T.R. (1968). Relative and absolute terrestrial abundances of the rare earths. In: *Origin and Distribution of the Elements* (L.H. Ahrens, ed.), pp. 889-911. Pergamon Press.

Johannesson, K.H. y Lyons, W.B. (1995). Rare earth element geochemistry of Colour Lake, an acidic freshwater lake on Axel Heiberg Island, Northwest Territories, Canada. *Chem. Geol.*, 119, 209-223.

Miekeley, N.; Couthino de Jesus, H.; Porto da Silveira, C.L.; Linsalata, P. y Morse, R. (1992). Rare-earth elements in groundwaters from the Osamu Utsumi mine and Morro do Ferro analogue study sites, Poços de Caldas, Brazil. *Jour. Geochem. Explor.*, 45, 365-387.

Möller, P. y Bau, M. (1993). Rare-earth patterns with positive cerium anomaly in alkaline waters from Lake Van, Turkey. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 117, 671-676.

Nordstrom, D.K.; Carlson-Fosch, V. y Oreskes, N. (1995). Rare Earth element (REE) fractionation during acidic weathering of San Juan Tuff, Colorado. The Geological Society of America. 1995 Annual Meeting. New Orleans, Luisiana, November 6-9, 1995. Abstracts with Programs. GS-Geochemistry III, Sesión 70, A-199.



## **El metamorfismo Hercínico de la Faja Pirítica (Provincias de Sevilla y Huelva)**

**A. Aparicio<sup>1</sup>, J.M. Brell<sup>2</sup>, R. García<sup>1</sup>, M.P. Lapuente<sup>3</sup>**

1. Museo Nacional de Ciencias Naturales. CSIC. José Gutiérrez Abascal, 2. 28006 Madrid.

2. Dpto. Estratigrafía. Facultad Ciencias Geológicas. Univ. Complutense. 28040 Madrid.

3. Dpto. Geología (Petrología y Geoquímica). Univ. Zaragoza. 50009 Zaragoza.

### **Resumen**

El metamorfismo hercínico de la Faja Pirítica se define de Baja Presión con temperaturas próximas a 200°C. Los índices de cristalinidad de la illita (Kubler) lo sitúan en ambiente anqui-epizonal. Las paragénesis encontradas son similares en los materiales Devónicos, Carboníferos y en el Paleozoico Inferior que limita la cuenca en su zona norte.

### **Abstract**

The Hercynian metamorphism in the Pyrite belt is of Low Pressure type, with temperatures about 200°C. On the basis of the illite crystallinity index (Kubler) this metamorphism is defined as anchi-epizonal. Similar paragenesis are founded in materials of Devonian, Carboniferous, and also Lower Paleozoic ages, which are delimiting the Pyrite belt to the north.

### **Introducción**

Dentro del sector SO del Hercínico español, la Faja Pirítica constituye el extremo mas meridional del Macizo Ibérico. Los materiales que la constituyen pertenecen al Paleozoico Superior. Devónico y Carbonífero ocupan una cuenca situada al sur de la zona de Ossa Morena formada por materiales plutónicos y del Paleozoico Inferior mayoritariamente.

El conjunto Devónico-Carbonífero de la Faja Pirítica ha experimentado los procesos de deformación y metamorfismo hercínicos que se muestran a su vez sincrónicos con una etapa intrusiva de rocas plutónicas acidas e intermedias (Aparicio et al. 1977) que originan fenómenos de contacto en la roca-caja. Una parte de estas manifestaciones de contacto corresponden a procesos de granitización que modifican fuertemente la composición de las rocas afectadas (Sanchez Cela y Aparicio 1982. 1991).

Dada la importancia minera de la Faja Pirítica los aspectos estructurales y estratigráficos han sido ampliamente estudiados desde antiguo. En época reciente ha sido publicada toda la cartografía geológica del sector por el ITGE a escalas 1/50000 y 1/200000, y son de destacar en el área de la Faja Pirítica y zonas limítrofes, los trabajos de Vázquez Guzmán y Fernández Pompa (1976) Gabaldón et al 1983, Crespo-Blanc y Orozco (1988), Apalategui y Sánchez (1991), Abalos y Eguiluz (1992, 1994), Azor et al 1994... etc.



Algunos aspectos sobre el metamorfismo de la Faja Pirítica y zonas limítrofes han sido estudiados por Lecolle (1970), Lecolle y Rogers (1976), Schermerhorn (1975, a y b), Quesada y Munhá 1990, Castro y de la Rosa (1991), Abalos et al 1991, López Munguira et al 1988, 1991, 1993.

Sin embargo las características metamórficas de los materiales pelíticos del Paleozoico Superior de la Faja Pirítica no han sido tratados hasta ahora con detalle, en cuanto a sus paragénesis, intensidad y condiciones físicas. En ello influye el hecho de tratarse en su mayor parte de materiales pizarrosos monótonos de baja intensidad metamórfica. En la bibliografía regional este metamorfismo es calificado como de bajo grado y le asignan una facies de esquistos verdes, zona de la clorita. Así un estudio algo más pormenorizado, permite encontrar algunas variaciones significativas en sus características y su continuidad con el metamorfismo que afecta al límite sur de la zona de Ossa Morena.

Para el desarrollo del trabajo se tomaron un total de 100 muestras en el área pirítica y zonas de borde. La localización de las muestras se puede observar sobre el esquema geológico de la Fig. 1. Fueron tomadas exclusivamente en materiales pelíticos y se prescindió de muestrear en series afectadas por procesos de granitización (señaladas como F.G. en Fig. 1), al tener modificadas su mineralogía y composición.

Las determinaciones mineralógicas de Rayos X fueron hechas sobre muestras en polvo y agregados orientados y sus condiciones se ajustan a las descritas en Aparicio et al. (1993) de acuerdo con los esquemas definidos en Dunoyer de Segonzac (1969), Kisch (1991). Para la obtención del parámetro  $b_0$  se ha seguido el método de las secciones perpendiculares a la pizarrosidad descrito por Sassi y Scolari (1974).

### Metamorfismo

En la Tabla 1 se indica la situación cronoestratigráfica de las muestras así como su composición y algunos parámetros metamórficos significativos.

En la figura-2 se expresa, en función de los índices de cristalinidad de la illita (I.C) (Kubler 1968) la situación metamórfica de las muestras pertenecientes al Carbonífero, Devónico y Paleozoico Inferior (borde de cuenca). La proyección del IC, para Devónico y Carbonífero, se realiza sobre los campos epizonal y anquizonal. En el Devónico el predominio es del campo epizonal, mientras en el Carbonífero dominan las muestras anquizontales. Igualmente se proyectan en ambos campos las muestras del Paleozoico Inferior. No existe pues, en función del IC, una neta relación con el nivel estratigráfico. Sin embargo la distribución superficial del IC en las muestras pertenecientes al Devónico, delimita una zona de mayor intensidad metamórfica en el área de Zalamea la Real, esta zona se prolonga durante el Carbonífero hacia el NO, quedando la zona de menor intensidad metamórfica (diagenética) en el extremo suroriental.

La distribución del parámetro  $b_0$ , que proporciona valores relativos de la presión (Guidotti y Sassi 1976, 1986), presenta sus valores mas altos en las muestras del Paleozoico Inferior en el borde Norte de la cuenca y en la franja devónica situada en este límite. Otro máximo de  $b_0$ , se observa en el centro del área estudiada para muestras pertenecientes al Devónico, y algo mas desplazado al NO durante el Carbonífero. En general los valores máximos de  $b_0$  se muestran concordantes con los mínimos del IC y ambos se encuentran desplazados de SE a



NO desde el Devónico al Carbonífero.

Tanto el Devónico como el Carbonífero experimentaron un proceso metamórfico de baja presión, con un ligero aumento de estas condiciones en el paso Carbonífero-Devónico-Paleozoico Inferior (Tabla 2), siendo el Paleozoico Inferior el que manifiesta ya un tránsito hacia presiones intermedias, hecho ya determinado por López Munguira et al (1993) en las pizarras cámbricas de Ossa Morena.

La secuencia de los valores medios de IC (Carbonífero-Devónico-Paleozoico Inferior) presenta una disminución de sus valores (excepción del Ordovícico) y por tanto mayor intensidad del metamorfismo coincidente con el incremento de  $b_0$ .

Devónico y Carbonífero presentan paragénesis similares (Tabla 1) por lo que la intensidad del metamorfismo que experimentaron debió de ser muy parecida.

Cuarzo+ilita±caolinita±clorita±clorita/vermiculita es la paragénesis mas frecuente. La aparición de plagioclasa (albita) se circunscribe a 4 muestras (3 del Carbonífero y 1 Devónica). La esmectita es igualmente rara y se localiza en 2 muestras del Carbonífero y 1 Devónica. La paragonita sólo está presente en 1 muestra Devónica y localizada en una fractura.

En las muestras del Paleozoico inferior, al Norte del área estudiada, se detectan paragénesis similares. La clorita, bastante frecuente, queda excluida en el sector NO, mientras que la caolinita se circunscribe a una amplia banda de dirección este-oeste, y se encuentra ausente al norte y borde SO.

Los interestratificados clorita/vermiculita, al igual que la ilita, se encuentran practicamente distribuidos por todas las formaciones incluyendo el Paleozoico Inferior.

Teniendo en cuenta esta identidad paragenética entre el Carbonífero y Devónico es deducible que las condiciones físicas del metamorfismo que les afectó fueron similares.

Si nos atenemos a la casi desaparición de la esmectita y a la no presencia de interestratificados ilita/esmectita se puede considerar que se alcanzaron temperaturas próximas a los 200°. (Kristmannsdóttir 1979, Schiffman y Fridleifsson 1991), aunque otros autores como Reyes y Cardile (1989) Abercrombie et al. (1994) sitúan la desaparición de esmectita por debajo de 200°. La presencia de esmectita solo en escasas muestras aisladas confirmaría el situarnos en unas condiciones próximas a su desaparición.

En los mismos límites de temperatura nos situaría la presencia de caolinita (Clayton et al 1968, Duroyer de Segonzaç 1969, Aoyagui y Kazama 1980, Weaver y Broekstra 1984, Curtis 1987).

Sin embargo la desaparición de caolinita en el sector norte, que incluye el Paleozoico Inferior, reflejaría un aumento de estas condiciones a  $T > 225^\circ$  e inferiores a  $320^\circ$  (Maxwell y Hower 1967, Velde 1977). Igualmente temperaturas inferiores a  $200^\circ$  pudieran haberse alcanzado en la franja sur donde la caolinita se encuentra ausente y los IC indican la menor intensidad metamórfica (Fig. 1).

Un cálculo aproximado de la presión que experimentaron los materiales se puede deducir a partir de los valores de  $b_0$  (Tabla 2) y de los cálculos realizados por Guidotti y Sassi 1976, 1986) teniendo en cuenta valores de  $T = 200^\circ$ . Así para el Cámbrico, los valores determinados



serían de  $\approx 1.2$  kb. valores que van decreciendo hasta el Carbonífero ( $P < 0.5$  kb). Esta variación de presión se observa en el diagrama de frecuencias del valor  $b_0$  para el Paleozoico Inferior, Devónico y Carbonífero (Fig. 3). Una comparación con otras áreas metamórficas significativas (Sassi y Scolari 1974), delimitan el metamorfismo de la Faja Piritica como de muy baja presión.

## Discussion

Uno de los principales problemas en el estudio metamórfico de los materiales paleozoicos del SO hercinico español radica en la dificultad de la limitación estratigráfica. La separación Devónico-Carbonífero no está suficientemente establecida debido a la ausencia de datos paleontológicos. Por otro lado la presencia masiva de rocas graníticas superficiales modifican ampliamente la composición de la roca original, dando lugar a formaciones granitizadas (FG). En numerosas ocasiones estas FG son tomadas como límite entre ambas formaciones, por lo que es muy posible que en algunos casos se estén individualizando series con la misma edad. Un dato a favor de ello se encuentra en la similitud de las paragénesis y de los parámetros metamórficos en Carbonífero y Devónico.

En cualquier caso el metamorfismo hercinico de la Faja Piritica se presenta como de muy baja presión, en contraposición a lo anteriormente establecido por Schemerhorn (1975 a y b) y Lecolle y Rogers (1976). Estos últimos autores asignan el metamorfismo de la Faja Piritica a la facies esquistos verdes con unas condiciones físicas ( $P = 4-5$  Kb,  $T = 350-400$ ) e I.C. de la ilita (2 a 2.7) sensiblemente diferentes a los determinados en este trabajo.

Dentro del Hercínico Ibérico y en áreas donde el Devónico está representado, no parece haber grandes diferencias en cuanto a la intensidad del metamorfismo, en comparación con el aquí estudiado. Tanto en el Sistema Central (Aparicio y Galán, 1980) como en Menorca (García et al 1992) y sectores de la Zona Cantábrica (Galán et al. 1985, Aparicio et al. 1993), estas condiciones pueden ser similares. Por otro lado el Carbonífero de la Faja Piritica presenta una intensidad de metamorfismo algo superior a la del Carbonífero de otras áreas hercinicas (Aparicio y Galán, 1980). Aparicio et al. (1991 a), García et al. (1992), si bien en la Zona Cantábrica (Aparicio et al. 1993) y Cordillera Ibérica (Aparicio et al. 1991 b) se encuentra una cierta similitud, siendo en este último caso donde incluso las presiones alcanzan valores  $< 1$  kb.

En la provincia de Cordoba, materiales carboníferos estudiados por Abalos et al. (1991) son asignados a un ambiente epizonal-anquizonal similar a lo encontrado en el área estudiada, pero no especifican las condiciones de este metamorfismo.

## Agradecimientos

A M.C. Sendra (Composición), A. Viloria, M. Castillejo (Preparación de muestras) y J.Arroyo (Dibujos)



## Bibliografía

- Abalos, B., Eguluz, L., Gil Ibarguchi, J.I. (1991). Evolución tectono-metamórfica del Corredor Blastomilonítico de Badajoz. Bol. Geol. Min., 102, 617-671.
- Abalos, B., Eguluz, L. (1992). Geología estructural del corredor Blastomilonítico de Badajoz-Córdoba. Bol. Geol. Min., 103, 3-41.
- Abalos, B., Eguluz, L. (1994). Evolución tectónica poliorogénica (cadomiense y hercínica) del Corredor Blastomilonítico de Badajoz-Córdoba. Bol. Geol. Min., 105, 57-84.
- Abercrombie, H.J., Hutcheon, I.E., Bloch, J.D., de Caritat, P. (1994). Silica activity and the smectite-illite reaction. Geology, 22, 539-542.
- Aoyagi, K., Kazama, T. (1980). Transformational changes of clay minerals, zeolites and silica minerals during diagenesis. Sedimentology, 27, 179-188.
- Apalategui, O., Sánchez, R. (1991). Síntesis y correlación de unidades en el borde meridional de la Zona de Ossa-Morena ZOM: Implicaciones geológicas. Bol. Geol. Min., 102, 339-342.
- Aparicio, A., Barrera, J.L., Casquet, C., Peinado, M., Tinao, J.M. (1977). El Plutonismo hercínico post-metamórfico en el SO del macizo hespérico (España). Bol. Geol. Min., 88, 497-500.
- Aparicio, A., Galán, E. (1980). Las características del metamorfismo hercínico de bajo y muy bajo grado en el sector oriental del Sistema Central (Provincia de Guadalajara). Estudios Geol., 36, 75-84.
- Aparicio, A., Brell, J.M., Guarás, B. (1991a). El metamorfismo hercínico de la Sierra de La Demanda (Provincias de Logroño y Burgos). Bol. Geol. Min., 102, 240-246.
- Aparicio, A., Brell, J.M., García, R., Tena, J., Gómez, J. (1991b). El Metamorfismo de bajo grado en el Paleozoico del sector central de la Cordillera Ibérica. Bol. Geol. Min., 102, 735-747.
- Aparicio, A., Brell, J.M., García, R. (1993). El Metamorfismo hercínico de bajo y muy bajo grado en la zona cantábrica (Provincia de León, Asturias, Cantabria). Bol. Geol. Min., 104, 439-461.
- Azor, A., González Lodeiro, F., Simancas, F. (1994). Tectonic evolution of the boundary between the Central Iberian and Ossa Morena zones (Variscan belt, southwest Spain). Tectonic, 13, 45-61.
- Castro, A., de la Rosa, J.D. (1991). Geotermometría de las anfibolitas de Acebuches en el sector de Almonastén La Real (Huelva). Geogaceta, 9, 14-17.



- Clayton, R.N., Muffler, L.J.P., White, D.E. (1968). Oxygen isotope study of calcite and silicates of the River Ranch N01 Well Salton Sea Geothermal field, California. Amer. J. Sci., 266, 968-979.
- Crespo-Blanc, A., Orozco, M. (1988). The southern Iberian Shear Zone a major boundary in the Hercynian folded belt. Tectonophysics, 148, 221-227.
- Curtis, C.D. (1987). Clay diagenesis. In: Geochemistry and mineral formation in the Earth Surface (Eds. R. Rodríguez Clemente, Y. Dardy). Proceedings of the International meeting "Geochemistry of the Earth Surface and Processes of mineral formation. Granada. CSIC, 585-596.
- Dunoyer de Segonzac, G. (1969). Les minéraux argileux dans la diagenese passage au metamorphisme. Mem. Serv. Carte Geolog. D'Alsace et de Lorraine, 29, 320 pág.
- Esquevin, J. (1969). Influence de la composition chimique des Illites sur leur cristallinite. Bull. Centre Rech. Pau SNPA, 3, 147-153.
- Gabaldon, V., Garrote, A., Quesada, C. (1983). El Carbonífero Inferior del Norte de la zona de Ossa morena (SO de España). X Congr s International du Stratigraphie et Geologie du Carbonif re. Madrid. Inst. Geol. Min., 173-186.
- Gal n, E., Aparicio, A., Doval, M. (1985). Characteristics of the Hercynian metamorphism in the Pola de Gordon Matallana Coal Basin, Leon Province, Spain. Clays and Clay Minerals, 29A, 352-353.
- Garc a, R., Brell, J.M., Aparicio, A. (1992). El metamorfismo del Paleozoico de la Isla de Menorca (Islas Baleares). Bol. Geol. Min., 103, 564-569.
- Guidotti, C.V., Sassi, F.P. (1976). Muscovite as a petrogenetic indicator mineral in pelitic schists. N.Jb. Miner. Abh., 127, 97-142.
- Guidotti, C.V., Sassi, F.P. (1986). Classification and correlation of metamorphic facies series by means of muscovite  $b_0$  data from Low-Grade Metapelites. Neues Jar. Min., 153, 3, 363-380
- Kisch, H.J. (1991). Illite crystallinity: recommendations on sample preparation x-ray diffraction settings, and interlaboratory samples. J. Metamorphic Geol., 9, 665-670.
- Kristmannsd ttir, H. (1979). Alteration of basaltic rocks by hydrothermal activity at 100-300 C. In: International Clay Conference (Eds. M.M. Morland & V.C. Farmer). Elsevier. New York, 410 pp.
- Kubler, B. (1968). Evaluation quantitative du metamorphisme par la cristallinit  de l'illite. Bull. Centre. Rech. Pau, vol. 2, n  2, 385-397.
- L colle, M. (1970). Note pr liminaire sur le m tamorphisme et la tectonique de la province pyrito-cuprif re de Huelva (Espagne). Cons quences p trologiques. C.R. Ac. Sc., Paris, 270, 1563-1566.



- Lécolle, M., Roger, G. (1976). Métamorphisme régional hercynien de "faible degré" dans la province pyrito-cuprifère de Huelva (Espagne). Conséquences pétrologiques. Bull. Soc. Geol. France. t. XVIII. 6. 1687-1698.
- López-Munguira, A., Sebastián Pardo, E., Nieto, F. (1988). Caracterización de las cloritas de las rocas metamórficas precámbricas en las zonas de Ossa-Morena y Centro-Ibérica Meridional. Bol. Soc. Esp. Min. 11-2, 41-42.
- López Munguira, A., Nieto, F., Sebastián Pardo, E., Velilla, N. (1991). The composition of phyllosilicates in Precambrian, low-grade, metamorphic clastic rocks from the Southern Hesperian Massif (Spain) used as an indicator to metamorphic conditions. Precambrian Research. 53, 267-279.
- López-Munguira, A., Nieto García, F., Sebastián Pardo, E. (1993). Caracterización de las micas de las pizarras cámblicas de la unidad Alconera (Zona de Ossa Morena). Su utilidad como indicadores de las condiciones metamórficas. Geogaceta. 13, 69-71.
- Maxwell, D., Hower, J. (1967). High-grade diagenesis and low-grade metamorphism of illite in the precambrian Belt series. Am. Mineral. 52, 847-857.
- Quesada, C., Munha, J. (1990). Ossa Morena Zone Metamorphism. In: Pre-Mesozoic geology of Iberia (Ed. R.D. Dallamayer y E. Martínez García). Springer Berlin, 280-291.
- Reyes, A.G., Cardile, C.M. (1989). Characterization of clay scales forming in Philippine geothermal wells. Geothermics. 18, 429-446.
- Sánchez Cela, V., Aparicio, A. (1982). Feldspathic-quartz rocks of sedimentary metamorphic and igneous facies, in relation to granization-transformation processes in the Hercynian massif of Spain. In: Transformists Petrology (Eds. F.K. Drescher-Kaden and S.S. Augustithis). Theophrastus publications SA. Atenas, 305 pp.
- Sánchez Cela, V., Aparicio, A. (1991). Basic-intermediate igneous rocks formed by transformation processes in the SW of Spain. Geologica Carpathica 42, 33-44.
- Sassi, F.P., Scolari, A. (1974). The  $b_0$  value of the potassic white micas as a barometric indicator in low-grade metamorphism. Contr. Min. Petr. 45, 143-152.
- Schermerhorn, L.J.G. (1975a). Pumpellyite facies metamorphism in the Spanish Pyrite Belt. Petrologie. 1, 71-86.
- Schermerhorn, L.J.G. (1975b). Spilites, regional metamorphism and subduction in the Iberian pyrite belt: some comments. Geologie en Mijnbouw, 54, 23-35.
- Schiffman, P., Fridleifsson, G.O. (1991). The smectite-chlorite transition in drill hole NJ-15 Nesjavellir geothermal field, Iceland: XRD, BSE and electron microprobe investigations. J. Metamorphic. Geol. 9, 679-696.



- Vazquez Guzman, F., Fernández Pompa, F. (1976). Contribucion al conocimiento geológico del Suroeste de España en relación con la prospección de depósitos de magnetitas. Mem. Int. Geol. Min., 89, 130 pp.
- Velde, B. (1977). A proposed phase diagram for illite expanding chlorite, corrensite and illite-mont, mixed layered minerals. Clays. Clay Miner., 25, 264-270.
- Weaver, C.E., Broekstra, B.R. (1984). Illite mica. In: Shale Slate metamorphism in southern Appalachians (Ed. C.E. Weaver and associates). Elsevier, Amsterdam, 67-199.



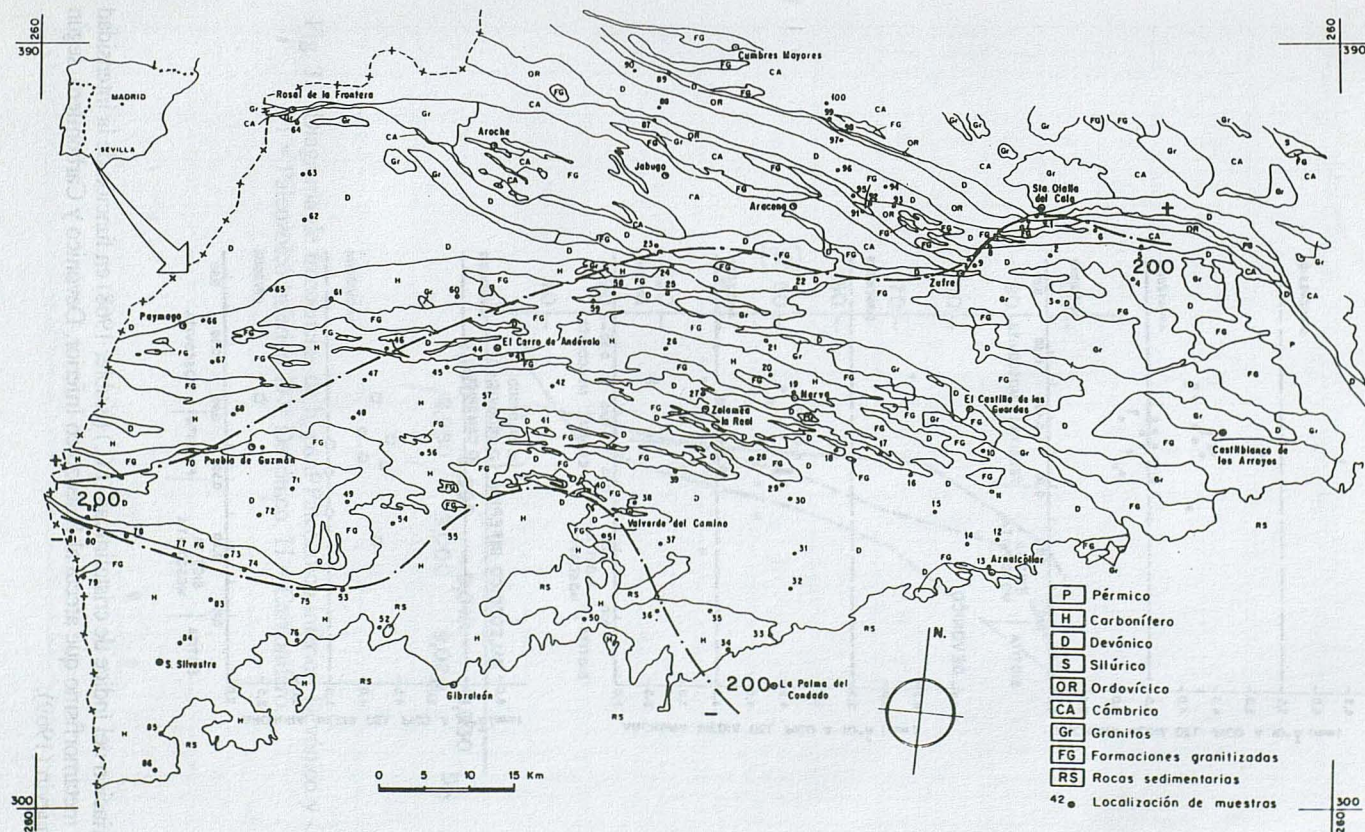


Fig. 1.- Esquema geológico del área estudiada basado en la cartografía existente (ITGE escalas 1/50.000 y 1/200.000 con la localización de las muestras estudiadas.



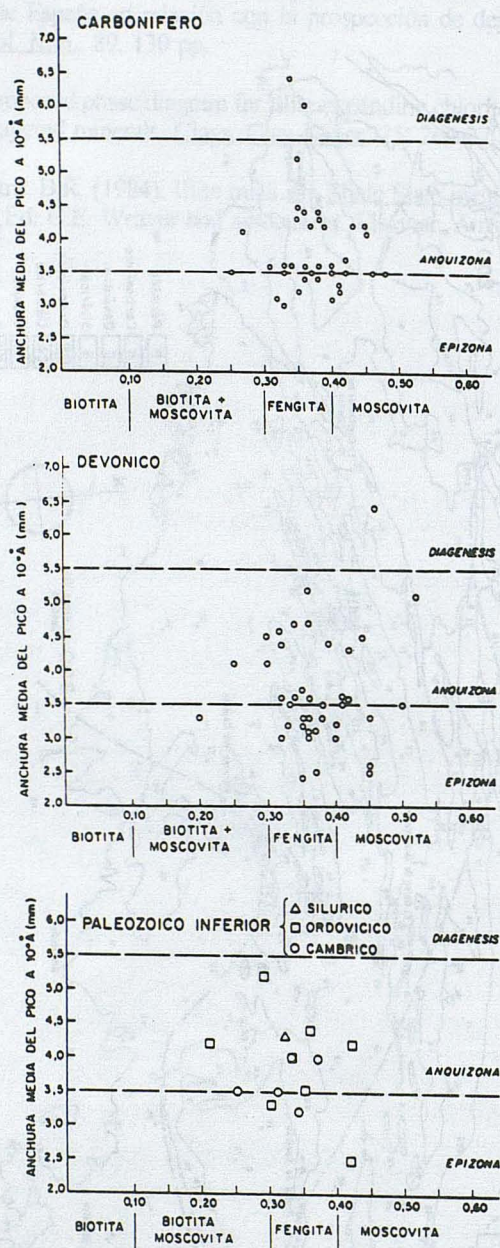


Fig. 2.- Variación del índice de cristalinidad (I.C.) (Kubler 1968) en función de la intensidad del metamorfismo que afecta al Paleozoico Inferior, Devónico y Carbonífero, según Esquevin (1969).



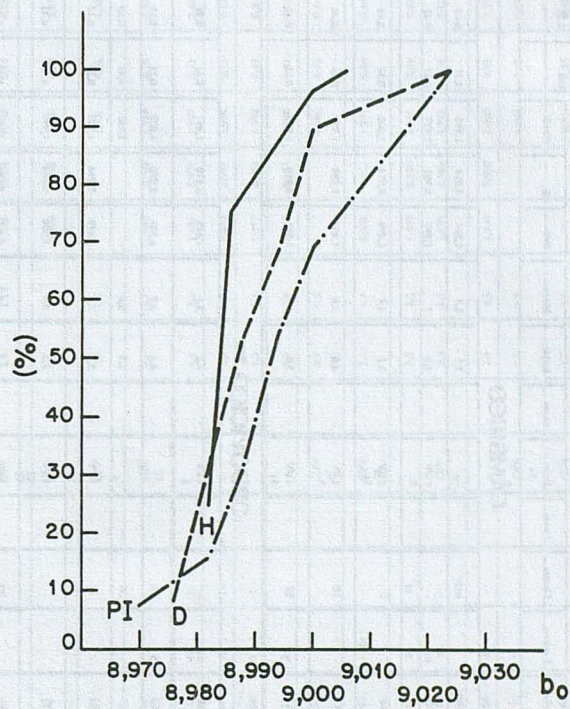


Fig. 3.- Diagrama de frecuencias de  $b_0$  para Paleozoico inferior, Devónico y Carbonífero.  
 PI = Paleozoico Inferior, D = Devónico, H = Carbonífero.



Tabla 1  
Composición de las muestras estudiadas y parámetros cristalográficos de interés metamórfico

Muestra		Cuadro	Filosil.	FELDSPATOS		Oxos	Mica	Caolinit.	Clorita	Fsmc.	Intcr.	Oxos	Kalter	Wener	b <sub>0</sub>	00.10	004 002	Peligro 2θ		Índice
				h	Ca-Na													Muscovita	Paragon.	
CÁMBRICO																				
6	37	59	-	4	-	100	-	-	inac.	-	-	-	3.5	2.5	1.504	9.024	1.995	0.31	0.60	100%
8	8	92	-	-	-	92	inac.	-	-	-	CUV 8	-	4.0	3	1.497	8.982	1.997	0.37	0.42	100%
91	15	75	-	-	-	74	-	-	-	-	CUV 26	-	3.2	4.4	1.499	8.994	2.000	0.34	0.46	100%
99	19	81	-	-	-	77	-	18	-	-	CUV 5	-	4.0	3.6	1.498	8.988	1.998	0.33	0.40	100%
100	22	88	-	-	-	67	-	22	-	-	CUV 11	-	3.5	4	1.503	9.018	1.999	0.25	0.43	100%
ORDOVÍCIO																				
1	14	86	-	inac.	-	80	12	-	-	-	CUV 8	-	4.2	3.8	1.495	8.970	1.997	0.42	0.58	100%
7	6	94	-	-	-	80	5	15	-	-	-	-	4.2	3.9	1.500	9.000	2.000	0.21	0.62	100%
87	21	79	-	-	-	65	-	35	-	-	-	-	2.5	5.8	-	-	2.001	0.42	0.50	100%
90	18	82	-	-	-	94	-	-	-	-	CUV 6	-	5.2	3.4	1.499	8.994	1.999	0.19	0.41	100%
92	15	75	-	-	-	72	-	-	-	-	CUV 22	-	3.5	5.1	1.500	9.000	1.999	0.35	0.42	100%
93	22	78	-	-	-	68	-	27	-	-	CUV 5	-	4.4	4.5	1.498	8.988	2.001	0.36	0.48	100%
95	25	75	-	-	-	82	-	12	-	-	CUV 6	-	3.3	5	1.501	9.006	2.000	0.30	0.44	100%
97	25	75	-	-	-	74	-	17	-	-	CUV 9	-	4.0	4.1	1.502	9.012	2.001	0.33	0.48	100%
SILÚRICO																				
98	16	94	-	-	-	90	-	-	-	-	CUV 10	-	4.3	3.4	1.499	8.994	2.000	0.32	0.34	100%



2	8	92	-	-	-	-	-	-	74	14	-	-	-	O/V 12	3.5	1.2	1.499	8.994	1.996	0.50	0.52	100%
3	17	83	-	-	-	-	-	-	76	6	-	-	-	O/V 12	4.5	3.6	1.500	9.000	1.997	0.44	0.50	100%
4	22	78	-	-	-	-	-	-	84	5	-	-	-	O/V 11	4.7	2.5	1.498	8.988	1.998	0.34	0.62	100%
9	16	84	-	-	-	-	-	-	82	-	-	-	-	O/V 18	6.4	2.17	1.498	8.988	1.998	0.66	0.45	100%
10	9	91	-	-	-	-	-	-	96	-	-	-	-	O/V 4	3.5	2.7	1.500	9.000	2.000	0.38	0.41	100%
11	7	98	-	-	-	-	-	-	95	-	-	-	-	O/V 5	4.7	2.8	-	2.001	0.36	0.50	100%	
12	12	88	-	-	-	-	-	-	84	-	-	-	-	O/V 16	3.5	3.7	1.498	8.988	1.998	0.38	0.43	100%
13	15	75	-	-	-	-	-	-	74	15	-	-	-	-	4.4	3.6	1.496	8.976	1.997	0.32	0.60	100%
14	11	89	-	-	-	-	-	-	64	22	14	-	-	-	2.5	4.6	1.497	8.982	1.996	0.45	0.42	100%
15	14	86	-	-	-	-	-	-	88	5	7	-	-	-	3.5	3.6	1.497	8.982	1.998	0.41	0.50	100%
16	15	85	-	-	-	-	-	-	92	8	-	-	-	-	3.6	2.6	1.497	8.982	2.000	0.41	0.35	100%
17	28	72	-	-	-	-	-	-	58	-	-	-	-	O/V 43	5.1	1.9	-	1.980	0.52	0.51	100%	
18	22	78	-	-	-	-	-	-	65	Indic	-	-	-	O/V 35	3.3	4.4	1.502	9.012	1.997	0.30	0.44	100%
21	17	83	-	-	-	-	-	-	63	16	21	-	-	-	3.3	5.5	1.499	8.994	1.996	0.36	0.52	100%
22	19	81	-	-	-	-	-	-	84	10	-	-	-	O/V 6	3.5	2.5	1.499	8.994	1.995	0.36	0.61	100%
23	9	91	-	-	-	-	-	-	68	32	-	-	-	-	3.6	4.6	1.500	9.000	2.000	0.42	0.57	100%
24	18	82	-	-	-	-	-	-	75	9	-	-	-	O/V 10	3.3	6.8	-	1.995	0.45	0.52	100%	
25	14	86	-	-	-	-	-	-	61	-	-	-	-	O/V 39	3.2	5.6	-	1.996	0.35	0.43	100%	
27	22	78	-	-	-	-	-	-	77	9	14	-	-	-	4.1	7.2	1.497	8.982	2.001	0.35	0.37	100%
28	29	71	-	-	-	-	-	-	95	5	-	-	-	-	3.5	4.2	1.504	9.024	1.991	0.33	0.48	100% 0.20
29	11	89	-	-	-	-	-	-	86	5	-	-	-	O/V 9	3.2	4.6	1.497	8.982	1.996	0.40	0.59	100%
30	10	90	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3.1	-	1.995	0.39	0.35	90%	-	











19	23	77	-	-	-	63	8	17	-	QV 12	3,5	4,3	1,498	8,988	1,999	0,15	0,47	100%	-
20	20	75	-	5	-	69	14	-	-	QV 17	3,6	3,1	1,498	8,988	1,999	0,31	0,42	100%	-
26	14	81	-	5	-	75	8	-	-	QV 17	3,4	4,9	1,499	8,994	1,998	0,38	0,46	100%	-
34	12	84	-	-	-	79	-	-	-	QV 21	4,3	2,7	1,498	8,988	2,001	0,37	0,32	90%	-
35	23	73	-	-	-	85	6	-	-	QV 9	3,6	4	1,497	8,988	2,000	0,36	0,45	100%	-
36	15	85	-	-	-	73	9	-	-	QV 6	4,3	4	1,498	8,988	1,984	0,35	0,47	100%	0,60
42	26	74	-	-	-	88	6	6	-	-	3,4	3,6	1,497	8,982	1,997	0,36	0,49	100%	-
43	28	72	-	-	-	86	-	-	-	QV 14	3,0	3,9	1,501	9,006	2,002	0,33	0,40	100%	-
44	26	74	-	-	-	85	-	10	-	QV 5	4,2	2,7	1,498	8,988	2,002	0,39	0,51	100%	-
45	20	80	-	-	-	67	10	23	-	-	3,6	4,6	1,497	8,982	1,999	0,38	0,54	100%	-
46	32	78	-	-	-	72	8	20	-	-	4,4	3,2	-	2,002	2,002	0,38	0,54	100%	-
47	17	73	-	-	-	74	-	18	8	-	3,1	3,1	1,500	9,000	2,000	0,32	0,58	100%	-
48	26	74	-	-	-	85	-	-	-	QV 15	3,5	3,9	1,497	8,982	2,000	0,37	0,48	100%	-
50	22	78	-	-	-	79	-	-	-	QV 21	4,2	2,7	1,498	8,988	2,001	0,43	0,42	100%	-
52	16	84	-	-	-	80	-	14	-	QV 6	3,5	3,6	1,499	8,994	2,001	0,40	0,40	100%	-
53	25	75	-	-	-	70	6	16	-	QV 8	3,2	3,5	-	2,002	2,002	0,35	0,41	100%	-
54	19	81	-	-	-	87	-	-	-	QV 13	3,6	3,5	1,497	8,982	2,002	0,34	0,38	100%	-
55	28	72	-	-	-	96	-	-	-	QV 14	3,2	4,3	1,498	8,988	2,002	0,35	0,38	100%	-
56	25	75	-	-	-	68	-	-	-	QV 32	3,2	5	-	2,002	2,002	0,41	0,42	100%	-
57	26	74	-	-	-	65	-	-	-	QV 40	3,3	5	1,498	8,988	2,002	0,41	0,40	100%	-
60	21	79	-	-	-	72	-	-	-	QV 28	3,5	4,5	1,498	8,988	2,003	0,37	0,41	100%	-







**Aplicación del geotermómetro isotópico sulfato-agua ( $\delta^{18}\text{O SO}_4^- - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$ ) en algunos sistemas termales alcalinos del Pirineo Central.**

L.F. Auqué<sup>(1)</sup>, J. Mandado<sup>(1)</sup>, P.L. López<sup>(1)</sup> y M.J. Gimeno<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> Área de Petrología y Geoquímica. Depto. Ciencias de la Tierra.  
Fac. Ciencias. Universidad de Zaragoza. 50009 ZARAGOZA.

<sup>(2)</sup> Programa de Comportamiento Ambiental de Contaminantes Convencionales.  
Edificio 20 T. CIEMAT-IMA. Avda. Complutense 22. 28086 MADRID.

**Abstract**

*The  $\delta^{18}\text{O SO}_4^- - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$  isotope geothermometer is applied to the Caldas de Bohi, Artes and Luchon alkaline thermal waters (Central Pyrenees). Subsurface temperatures obtained using this geothermometer and those calculated from chemical geothermometers are in close agreement for the Artes and Caldas systems. These results support the existence of oxygen isotope equilibrium between sulphate and water in the reservoirs of both geothermal systems. For the Luchon system, however, isotope geothermometer provides temperature values clearly lower than those predicted by chemical geothermometry.*

*In view of the known kinetic constraints for the  $^{18}\text{O}$  exchange reaction, the time to reach isotope equilibrium can be deduced for the relevant temperature and pH conditions of the fluids. The calculated values agree with the residence times of thermal waters dated in some Pyrenean systems. In the Luchon system the age of the thermal waters would be enough to attain isotope equilibrium and therefore secondary mechanisms during the ascent of thermal solutions must have disturbed the deep  $\delta^{18}\text{O}$  values.*

**1. Introducción**

Los sistemas hidrotermales de aguas alcalinas, instalados en los materiales graníticos del Pirineo, constituyen un conjunto ampliamente estudiado de manifestaciones con caracteres homogéneos. La aplicación de técnicas geotermométricas químicas para la evaluación de la temperatura en el reservorio de estos sistemas comenzó ya en la década de los 70, con los trabajos de prospección geotérmica llevados a cabo en la vertiente pirenaica francesa. Y, desde entonces, los estudios realizados sobre los procesos de interacción agua-roca (y situaciones de equilibrio heterogéneo en el reservorio) en este tipo de sistemas han contribuido tanto al desarrollo específico de calibrados geotermométricos químicos como al planteamiento de técnicas geotermométricas basadas en cálculos de modelización geoquímica (Michard 1990; Auqué, 1993).

Sin embargo, la aplicación de técnicas geotermométricas isotópicas no ha constituido una metodología normalmente usada en sistemas geotermales de este tipo, probablemente porque la bondad de los resultados ofrecidos por la geotermometría química, con requerimientos analíticos más sencillos y baratos, las han excluido. Únicamente en algunos trabajos, como los de Criaud y Vuataz (1984) en los manantiales de Luchon (Francia) y de Rançon *et al.* (1984) en los de Les Escaldes (Andorra), se utiliza puntualmente la reacción de intercambio isotópico del oxígeno entre los sulfatos disueltos y el agua (geotermómetro sulfato-agua,  $\delta^{18}\text{O SO}_4^- - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$ ) para calcular la temperatura de las soluciones en profundidad.



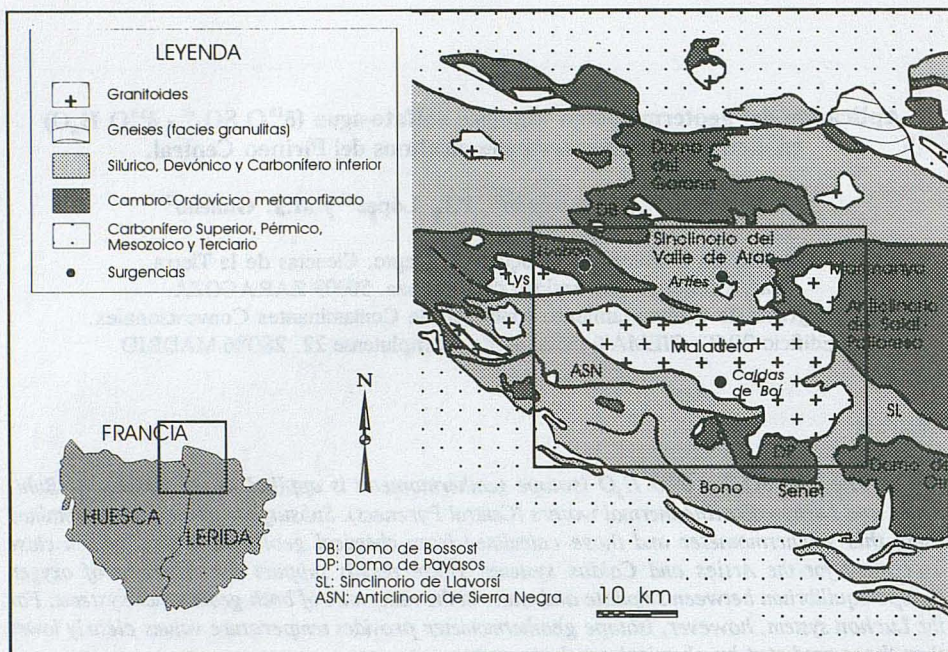


Figura 1. Esquema geológico y situación de los sistemas geotermales estudiados.

El geotermómetro  $\delta^{18}\text{O SO}_4^- - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$  es una de las técnicas isotópicas más usadas (y, aparentemente, con mejores resultados) para el cálculo de temperaturas de base en reservorios de media-alta entalpía (McKenzie y Truesdell, 1977; Truesdell y Hulston, 1980). Sin embargo, las temperaturas de base que proporciona en los dos sistemas mencionados anteriormente son inferiores a las calculadas mediante geotermometría química, lo que parece cuestionar su adecuación a este tipo de sistemas geotermales de aguas alcalinas.

En este trabajo se presentan los resultados del geotermómetro sulfato-agua ( $\delta^{18}\text{O SO}_4^- - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$ ) en dos sistemas geotermales del Pirineo Central español, los manantiales de Caldas de Boí y Arties, para los que se dispone de análisis isotópicos adecuados. Los resultados obtenidos, junto con las recientes dataciones realizadas en distintos sistemas geotermales de la vertiente francesa permitirán analizar la posibilidad de que se establezca un equilibrio isotópico en el reservorio de estos sistemas y/o discutir la existencia de procesos secundarios que alteren este equilibrio durante el ascenso de las soluciones. Uno de los sistemas en los que se han datado las soluciones termales es el de Luchon, motivo por el que se reevaluarán los resultados obtenidos por Criaud y Vuataz (1984) con el geotermómetro  $\delta^{18}\text{O SO}_4^- - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$  en este sistema.

## 2. Caracteres generales de los sistemas

Los manantiales geotermales de Arties y Caldas de Boí (provincia de Lérida) están situados en la zona axial del Pirineo Central español, próximos a la frontera francesa y en la misma área geográfica que los manantiales de Luchon (Francia). Todos ellos se encuentran



relacionados con los macizos graníticos existentes en la zona, si bien algunos de estos manantiales surgen a través de los materiales carbonatados o metamórficos circundantes (figura 1). Las surgencias de Caldas de Bohí manan a través de las granodioritas del Macizo de la Maladeta; la de Arties lo hace a través de los materiales carbonatados devónicos que circundan el macizo del mismo nombre; y las de Luchon a través de granitos pegmatíticos y esquistos metamórficos asociados al Domo de Bossost (Chevalier-Lemire *et al.*, 1990).

Excepto en el caso del manantial único de Arties, la parte terminal del circuito hidrotermal de estos sistemas se diversifica en múltiples surgencias, afectadas por procesos de enfriamiento conductivo y de mezcla con soluciones más frías, de intensidad variable. Así, los manantiales de Caldas de Bohí constituyen un amplio conjunto de hasta 37 surgencias (19 inventariadas), con temperaturas entre 6 y 50 °C (Auqué, 1993; Auqué *et al.*, 1996); y los de Luchon están constituidos por 18 manantiales con temperaturas entre 20 y 70 °C (Criaud y Vuataz, 1984; Chevalier-Lemire *et al.*, 1990).

Los rasgos composicionales de las soluciones de estos manantiales son análogos a los establecidos para el resto de sistemas geotermales pirenaicos (tabla 1): muy baja mineralización, valores de pH elevados, sodio como catión dominante, ausencia de un anión en concentraciones preponderantes sobre los demás, caracteres sulfurosos y muy bajas concentraciones de magnesio. Todos estos caracteres son los propios del grupo de las aguas termales alcalinas, uno de los dos tipos en que pueden clasificarse las aguas termales relacionadas con materiales graníticos (el otro tipo es el de las aguas ricas en CO<sub>2</sub>; Sanjuan *et al.*, 1988; Michard, 1990).

En los manantiales, las aguas presentan una muy baja presión parcial de CO<sub>2</sub> (con valores de log pCO<sub>2</sub> de -4.94 en el manantial de Estufa, de -4.89 en Arties y de -3.26 en Luchon) y una proporción importante de la sílice disuelta se encuentra ionizada debido a los elevados valores de pH (Auqué *et al.*, 1996). En condiciones de surgencia las soluciones se encuentran sobresaturadas respecto a feldespato potásico, albita y cuarzo, minerales con los que establecen relaciones de equilibrio termodinámico en el reservorio (Auqué, 1993). Y, además, las aguas de todos los manantiales se encuentran en equilibrio respecto a calcita y caolinita, independientemente de la temperatura y pH de surgencia. Ello implica que la evolución de las soluciones termales durante su ascenso tiene lugar en sistema abierto, con procesos de reequilibrio, al menos respecto a ese último mineral (Michard y Fouillac, 1980; Michard y Roekens, 1983; Auqué, 1993; Auqué *et al.*, 1996).

### 3. Metodología

#### 3.1. Datos analíticos

Los datos composicionales de las surgencias estudiadas en este trabajo se indican en la tabla 1. Los del manantial de Arties proceden del muestreo presentado por Auqué *et al.* (1996); los del manantial de Estufa (Caldas de Bohí) fueron determinados en una campaña de prospección geotérmica realizada por ENHER (Empresa Nacional Hidroeléctrica del Ribagorzana, S.A.) en 1985 y aparecen recogidos en las recopilaciones analíticas de manifestaciones termales del Servei Geològic de Catalunya; los de Luchon (Forage 1) han sido tomados del trabajo de Criaud y Vuataz (1984) y corresponden a muestras de un sondeo realizado en ese sistema. Los datos isotópicos manejados para las surgencias de Arties y Caldas fueron obtenidos por ENHER en el muestreo anteriormente mencionado.



Tabla 1. Datos químicos e isotópicos de las surgencias termales estudiadas en el Pirineo Central. Las concentraciones de los elementos aparecen expresadas en mmoles/l y los valores isotópicos están referidos a SMOW.

	Arties	Estufa (CALDAS)	Forage 1 (LUCHON) <sup>(1)</sup>
Temperatura (°C)	39.7	49.3	70.1
pH (campo)	9.52	9.34	8.60
Eh (mV)	-0.418	-0.365	-0.183
Alcalinidad total	1.53	1.03	2.25
SO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	0.304	0.489	0.08
Cl <sup>-</sup>	0.807	1.325	1.69
F <sup>-</sup>	0.276	0.181	0.431
SiO <sub>2</sub>	1.272	1.182	1.42
Na <sup>+</sup>	2.931	3.088	4.33
K <sup>+</sup>	0.052	0.059	0.118
Ca <sup>+2</sup>	0.048	0.037	0.090
Mg <sup>+2</sup>	< 2.0·10 <sup>-3</sup>	< 2.0·10 <sup>-3</sup>	1.6·10 <sup>-3</sup>
Al <sup>+3</sup>	0.727·10 <sup>-3</sup>	1.82·10 <sup>-3</sup>	1.12·10 <sup>-3</sup>
Li <sup>+</sup>	----	0.075	0.033
δ <sup>18</sup> O H <sub>2</sub> O	-11.76	-11.12	-11.40
δ <sup>18</sup> O SO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	6.30	3.75	8.00

<sup>(1)</sup> Datos de Criaud y Vuataz (1984).

Para la realización de los análisis isotópicos se escogieron las surgencias *a priori* más representativas del quimismo existente en el reservorio de cada sistema. En el de Caldas de Bohí y de Luchon (constituidos por múltiples surgencias), los análisis isotópicos se realizaron en aquellas cuyas características geoquímicas (mayor temperatura, nulos contenidos de tritio y/o sin concentraciones apreciables de trazadores "superficiales" como el Mg; p. ej. Michard, 1990) excluyan, al menos, la presencia de modificaciones composicionales secundarias producidas por los procesos de mezcla con aguas más superficiales, efectivos en estos sistemas.

En el caso del manantial único de Arties, los nulos contenidos de tritio y la constancia en el tiempo de su composición química (los datos obtenidos en el muestreo de ENHER en 1985 son prácticamente coincidentes a los obtenidos por Auké *et al.*, 1996) aseguran también la ausencia de ese tipo de modificaciones.



### 3.2. Geotermómetros químicos

La aplicación de una determinada técnica geotermométrica requiere que se corresponda con una situación de equilibrio en el reservorio y que los elementos involucrados en ese equilibrio no se vean modificados durante el ascenso de las soluciones (Auqué *et al.*, 1986). Pero la verificación de estos condicionamientos básicos rara vez puede hacerse *a priori*. Una vez obtenidos los resultados es cuando se establece su verosimilitud de forma comparativa con los ofrecidos por otros geotermómetros.

Para verificar los resultados del geotermómetro  $\delta^{18}\text{O SO}_4^{2-} - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$  en los manantiales estudiados se han utilizado los geotermómetros químicos más adecuados para los sistemas de aguas termales alcalinas. De esta forma se han utilizado técnicas geotermométricas basadas en los contenidos de sílice (geotermómetro  $\text{SiO}_2$ -cuarzo), considerando las correcciones necesarias para valorar proporciones importantes de sílice ionizada en disolución (véase, por ejemplo, Arnorsson *et al.*, 1983).

Uno de los geotermómetros más fiables en este tipo de sistemas es el Na-K, basado en el equilibrio albita-feldespato potásico existente en el reservorio de estos sistemas (Michard, 1990; Auqué, 1993). Se han utilizado dos calibrados de este geotermómetro: el primero, de carácter teórico, derivado de los datos termodinámicos propuestos por Michard (1983) para el equilibrio antes mencionado; y el segundo, de origen empírico, formulado por Michard (1990) mediante un ajuste a datos de sistemas geotermales de aguas alcalinas.

Y, por último, se han empleado los geotermómetros Ca-K (Michard, 1990) y el Na-K-Ca (Fournier y Truesdell, 1973) considerando en la formulación de este último el valor de  $\beta=4/3$  ya que es el que proporciona resultados mas consistentes en sistemas geotermales de este tipo (Vandelannoote, 1984; Michard *et al.*, 1986).

### 3.3. Geotermómetro $\delta^{18}\text{O SO}_4^{2-} - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$

Esta técnica geotermométrica hace uso de las variaciones que experimenta el coeficiente de fraccionamiento isotópico del oxígeno entre los iones sulfatados en solución y el agua, al cambiar la temperatura. Estas variaciones se ha ajustado a partir de datos experimentales de distinta procedencia. Originalmente, las ecuaciones de ajuste utilizadas procedían de las experiencias de Lloyd (1968), de las que se obtenía un ajuste tal que:

$$1000 \ln \alpha_{\text{SO}_4-\text{H}_2\text{O}} = 3.251 \cdot \frac{10^6}{T^2} - 5.6 \quad (1)$$

y de Mizutani y Rafter (1969) y Mizutani (1972) para las que la ecuación de ajuste era:

$$1000 \ln \alpha_{\text{SO}_4-\text{H}_2\text{O}} = 2.88 \cdot \frac{10^6}{T^2} - 4.1 \quad (2)$$

y en las que el coeficiente de fraccionamiento isotópico está expresado como  $1000 \ln \alpha$  y T es la temperatura en escala absoluta (°K).



Ambas ecuaciones concuerdan razonablemente bien en el rango de 100-200 °C, aunque a menores temperaturas haya ciertas discrepancias. Las experiencias de Mizutani y Rafter (1969) se llevaron a cabo a temperaturas entre 100 y 300 °C por lo que parece lógico pensar en posibles desviaciones de este ajuste a temperaturas menores; las experiencias de Lloyd (1968) incluyen datos en el rango de 0 a 100 °C, aunque los valores obtenidos sugieren la posibilidad de que no correspondan realmente a valores determinados en condiciones de equilibrio (McKenzie y Truesdell, 1977).

Las anteriores ecuaciones consideran un factor de fraccionamiento para el oxígeno entre CO<sub>2</sub> y agua de 1.047 a 25 °C. Considerando un valor más reciente para este dato, de 1.0412 (procedente del trabajo de O'Neil *et al.*, 1975), las ecuaciones (1) y (2) quedan:

$$1000 \ln \alpha_{\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}} = 3.251 \cdot \frac{10^6}{T^2} - 5.1 \quad (3)$$

y

$$1000 \ln \alpha_{\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}} = 2.88 \cdot \frac{10^6}{T^2} - 3.6 \quad (4)$$

respectivamente (McKenzie y Truesdell, 1977).

Estos nuevos calibrados son los incluidos por Friedman y O'Neil (1977) en su amplia revisión y tabulación de coeficientes de fraccionamiento isotópico para distintos sistemas. Más recientemente, Giggenbach *et al.* (1983) han planteado un calibrado medio entre los de Lloyd (1968) y Mizutani y Rafter (1969), tal que:

$$1000 \ln \alpha_{\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}} = 3.0655 \cdot \frac{10^6}{T^2} - 4.9 \quad (5)$$

En la figura 2 se han representado los valores de los coeficientes de fraccionamiento isotópico en función de la temperatura deducidos a partir de las ecuaciones (3), (4) y (5) que serán las utilizadas en este trabajo. Como puede apreciarse, en el rango de 0 a 100 °C, los dos calibrados propuestos por McKenzie y Truesdell (1977) son los que proporcionan los valores extremos, siendo los de la ecuación 5 (Giggenbach *et al.*, 1983) prácticamente coincidentes entre 75 y 125 °C con los obtenidos a partir de la ecuación (4).

#### 4. Valores de temperatura en el reservorio de los sistemas

En la tabla 2 se presentan los resultados proporcionados por los distintos geotermómetros químicos utilizados. Como puede apreciarse, los valores de temperatura calculados por todos ellos para cada manantial son muy similares, obteniéndose un promedio de  $100.8 \pm 7.2$  °C para el reservorio de Arties, de  $105.8 \pm 6.2$  °C en el de Caldas de Bohí y de  $122 \pm 8$  °C en los manantiales de Luchon. Los valores de temperatura obtenidos resultan asimismo coincidentes con los deducidos por Auqué (1993) utilizando metodologías más elaboradas de modelización geoquímica (con valores de 115, 110 y 125 °C para los sistemas de Arties, Caldas de Bohí y Luchon, respectivamente). Estos rangos de temperatura servirán, por tanto, de referencia para valorar los proporcionados por el geotermómetro sulfato-agua ( $\delta^{18}\text{O SO}_4 = \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$ ).



**Tabla 2:** Valores de temperatura en el reservorio de los sistemas obtenidos mediante distintos geotermómetros químicos.

	Na-K		Ca-K	Na-K-Ca ( $\beta = 4/3$ )	SiO <sub>2</sub> -Cuarzo (corregido)
	Michard (1983)	Michard (1990)			
<b>Artiés</b>	108.0	95.8	96.7	93.6	104.0
<b>Estufa</b>	112.0	99.6	106.8	105.0	105.0
<b>Forage 1</b>	130.0	118.9	117.8	114.0	121.0

En la tabla 3 se presentan los resultados numéricos proporcionados por el geotermómetro isotópico (junto con los coeficientes de fraccionamiento isotópico, expresado como  $1000 \ln \alpha$ , deducibles a partir de los datos presentados en la tabla 1) y en la figura 2 se muestran gráficamente los rangos de temperatura deducidos para cada sistema.

En los manantiales de Luchon, la temperatura calculada a partir de los datos del sondeo "Forage 1", es de  $86 \pm 5$  °C, considerablemente más baja que la obtenida mediante técnicas geotermométría química (tabla 2). Sin embargo, en el manantial de Estufa (Caldas de Bohí) la temperatura de base calculada por el geotermómetro isotópico es de  $125.5 \pm 4.5$  °C, ligeramente superior a la previamente establecida. Y, por último, en el caso de Arties la temperatura proporcionada por el geotermómetro isotópico es de  $96 \pm 5$  °C, prácticamente coincidente con el rango establecido mediante geotermometría química ( $100.8 \pm 7.2$  °C; tabla 2).

Los buenos resultados proporcionados por el geotermómetro  $\delta^{18}\text{O SO}_4 = -\delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$  en los sistemas de Caldas de Bohí y Arties indican que los valores del coeficiente de fraccionamiento isotópico del oxígeno responden a una verdadera situación de equilibrio en sus reservorios. Y, además, que estos valores no han tenido que ser modificados de forma importante durante el ascenso de las soluciones termales hasta la surgencia.

**Tabla 3:** Valores de temperatura obtenidos mediante distintos calibrados del geotermómetro sulfato-agua ( $\delta^{18}\text{O SO}_4 = -\delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$ ) para los manantiales estudiados.

	1000 $\ln \alpha$	Mckenzie y Truesdell (1977)		Giggenbach <i>et al.</i> (1983)
		Ec. (3)	Ec. (4)	
<b>Arties</b>	18.06	101	91	92
<b>Estufa</b>	14.87	130	122	121
<b>Forage 1</b>	19.4	91	81	82



En el caso de Luchon el geotermómetro isotópico no suministra resultados consistentes con los proporcionados por el resto de técnicas geotermométricas. Sin datos adicionales resulta difícil decidir (Criaud y Vuataz, 1984) si la causa de esta discrepancia de resultados se debe a la inexistencia del necesario equilibrio isotópico en el reservorio de este sistema o a la actuación de procesos secundarios que alteren los valores de un supuesto equilibrio en profundidad durante el ascenso de las soluciones.

Los manantiales seleccionados para la realización de las determinaciones isotópicas eran los inicialmente más representativos de los caracteres composicionales esperables en profundidad (ver Metodología). Sin embargo, los valores del coeficiente de fraccionamiento isotópico del oxígeno pueden verse afectados por procesos difícilmente detectables en un análisis químico normal. Los fenómenos de oxidación de los sulfuros disueltos durante el ascenso a la superficie de las soluciones (frecuentemente descritos en este tipo de sistemas como, por ejemplo, en Luchon; Criaud y Vuataz, 1984) o la presencia de actividad bacteriana sulforreductora en la mayoría de estos manantiales (Auqué, 1993) pueden producir modificaciones en esos valores, incluso en condiciones de surgencia.

Los efectos de este tipo de procesos secundarios son casi siempre difíciles de aquilatar y, por tanto, también resulta difícil diferenciarlos de la inexistencia de una situación de equilibrio isotópico en profundidad. Aprovechando los datos existentes sobre la cinética de reacción del intercambio isotópico de oxígeno entre sulfatos y agua puede resultar más fácil estimar el tiempo necesario para alcanzar una situación de equilibrio isotópico en estos sistemas y decidir, así, si es factible la existencia de esa situación de equilibrio. De esta forma, en función de los resultados obtenidos, la presencia de modificaciones secundarias podrá ser evaluada de forma deductiva.

## 5. Cinética de reacción y tiempo de residencia de las soluciones

La tasa de reacción para el sistema binario involucrado en este geotermómetro ha sido analizada por diversos autores (Lloyd, 1968; Mizutani y Rafter, 1969), encontrando que la vida media ( $t_{1/2}$ ) de este intercambio isotópico está condicionada no sólo por la temperatura sino también, y de forma muy importante, por el pH de la solución. De esta forma, los resultados de Lloyd (1968) indican que la vida media de este intercambio isotópico puede expresarse como:

$$\log t_{1/2} = 2.48 \cdot \frac{10^3}{T} + b \quad (6)$$

en la que  $b$  es un parámetro dependiente del pH con valores de 0.28 a pH=9, de -1.17 a pH=7 y de -2.07 a pH = 3.8. En principio, los resultados cinéticos así definidos presentan algunas discrepancias con los más recientes de Chiba y Sakai (1985), pero son los que en su aplicación al estudio de posibles situaciones de equilibrio isotópico en sistemas naturales proporcionan una respuesta más coherente, incluso en sistemas de baja temperatura (p. ej. Fouillac *et al.*, 1987; Fouillac *et al.*, 1990).

Considerando los valores de pH calculados mediante técnicas de modelización en los reservorios de estos sistemas (entre 8.1 y 8.6 para los sistemas considerados; Auqué, 1993) y la temperatura definida por las distintas técnicas geotermométricas, puede estimarse el valor de  $t_{1/2}$  mediante la ecuación (6). Conociendo este valor, puede calcularse el tiempo necesario para que la reacción de intercambio isotópico alcance el equilibrio en esas condiciones.



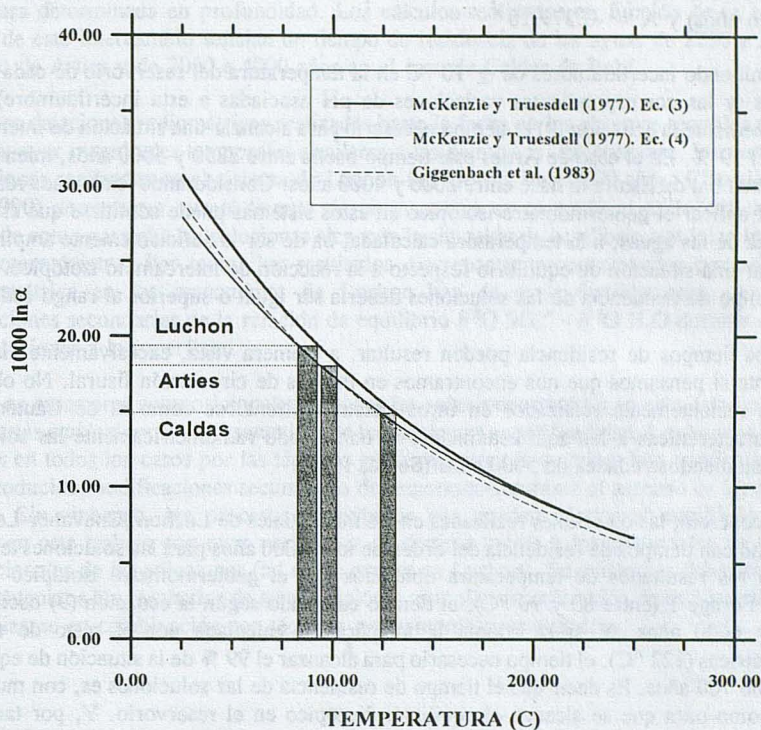


Figura 2. Rangos de temperatura calculados para los sistemas estudiados según los calibrados del geotermómetro  $\delta^{18}\text{O SO}_4^{2-} - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$  propuestos por McKenzie y Truesdell (1977) y por Giggenbach *et al.* (1983).

Suponiendo una cinética de reacción de primer orden para el intercambio isotópico de oxígeno entre sulfato y agua, la tasa de reacción puede obtenerse mediante la ecuación:

$$\ln(1-f) = -k \cdot t \quad (7)$$

en la que  $f$  es la fracción de oxígeno intercambiada,  $k$  es la constante de tasa de reacción y  $t$  es el tiempo transcurrido. La constante  $k$  puede definirse en función de  $t_{1/2}$ , tal que:

$$k = \frac{0.693}{t_{1/2}} \quad (8)$$

de manera que la ecuación (7) puede traducirse en:

$$t \% = A \cdot \log(1-f) \cdot t_{1/2} \quad (9)$$



en la que  $t\%$  es el tiempo necesario para que se produzca un determinado % de intercambio isotópico (en años) y  $A = -0.379 \cdot 10^{-3}$ .

Admitiendo incertidumbres de  $\pm 10^\circ\text{C}$  en la temperatura del reservorio de cada uno de los sistemas (y las correspondientes variaciones de pH asociadas a esta incertidumbre) puede calcularse mediante la ecuación (9) el tiempo necesario para alcanzar una situación de intercambio isotópico del 99 %. En el caso de Arties este tiempo oscila entre 2250 y 5000 años, mientras que en el del manantial de Estufa lo hace entre 2000 y 4000 años. Considerando los buenos resultados obtenidos al aplicar el geotermómetro isotópico en estos sistemas puede admitirse que el tiempo de residencia de las aguas, a la temperatura calculada, ha de ser lo suficientemente amplio como para alcanzar una situación de equilibrio respecto a la reacción de intercambio isotópico. Y, por tanto, el tiempo de residencia de las soluciones debería ser igual o superior al rango estimado.

Estos tiempos de residencia pueden resultar, a primera vista, excesivamente elevados, especialmente si pensamos que nos encontramos en medios de circulación fisural. No obstante, en estudios recientemente realizados en otros sistemas pirenaicos como el de Cauterets (de similares características a los aquí estudiados) se han datado radiométricamente las soluciones termales, obteniéndose edades de 5000 años (Soulé, 1990).

En concreto, las dataciones realizadas en los manantiales de Luchon (Chevalier-Lemire *et al.*, 1990) indican tiempos de residencia del orden de los 10000 años para las soluciones termales. Admitiendo los resultados de temperatura obtenidos por el geotermómetro isotópico para la muestra de Forage 1 (entre 80 y 90  $^\circ\text{C}$ ), el tiempo calculado según la ecuación (9) oscila entre los 3500 y 6600 años. Y si se adopta la temperatura calculada por el resto de técnicas geotermométricas (122  $^\circ\text{C}$ ), el tiempo necesario para alcanzar el 99 % de la situación de equilibrio es de tan sólo 700 años. Es decir que el tiempo de residencia de las soluciones es, con mucho, el suficiente como para que se alcance el equilibrio isotópico en el reservorio. Y, por tanto, los resultados discordantes proporcionados por el geotermómetro  $\delta^{18}\text{O SO}_4 = -\delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$  en este sistema deben ser producidos por modificaciones secundarias de este equilibrio en la parte terminal del circuito hidrotermal.

Globalmente los resultados obtenidos indican que el tiempo de permanencia de las soluciones termales en este tipo de sistemas será, frecuentemente, el suficiente para alcanzar la situación de equilibrio isotópico necesaria para el uso del geotermómetro  $\delta^{18}\text{O SO}_4 = -\delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$ . Sin embargo, esta situación de equilibrio puede verse afectada por modificaciones secundarias de difícil evaluación, motivo por el que la utilización de esta técnica geotermométrica ha de plantearse en combinación con otras más contrastadas y de más fácil verificación.

## 6. Conclusiones

La aplicación de distintos calibrados del geotermómetro isotópico sulfato-agua ( $\delta^{18}\text{O SO}_4 = -\delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$ ) a los sistemas geotermales de Arties y Caldas de Boí ha suministrado unos valores de temperatura en profundidad de  $96 \pm 5^\circ\text{C}$  y de  $125.5 \pm 4.5^\circ\text{C}$  respectivamente, similares a los deducidos por los geotermómetros químicos tradicionalmente utilizados en estos sistemas. Sin embargo, se ha verificado que en los manantiales de Luchon la temperatura proporcionada por este geotermómetro es considerablemente más baja que la establecida mediante técnicas geotermométricas clásicas (Criaud y Vuataz, 1984) o de modelización geoquímica (Auqué, 1993), de forma análoga a lo que ocurre en los manantiales de Les Escaldes (Rançon *et al.*, 1984).

El tiempo de residencia de las soluciones termales en el circuito hidrotermal de los sistemas de Arties y de Caldas de Boí debe ser, por tanto, lo suficientemente prolongado como



para alcanzar una situación de equilibrio en el intercambio isotópico  $\delta^{18}\text{O SO}_4 = - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$ , a la temperatura determinada en profundidad. Los cálculos realizados en función de la cinética de reacción de este intercambio señalan un tiempo de residencia de las aguas de 2250 a 5000 años en el caso de Arties y de 2000 a 4000 años en el caso de Caldas de Bohí.

Las dataciones radiométricas realizadas hasta la fecha en los sistemas termales pirenaicos parecen apoyar magnitudes temporales similares a las deducidas. En concreto, los resultados de las dataciones realizadas en el sistema de Luchon (en torno a los 10000 años; Chevalier-Lemire *et al.*, 1990) demuestran que el tiempo de permanencia en el acuífero es lo suficientemente prolongado como para que las soluciones alcancen la situación de equilibrio isotópico involucrada en el geotermómetro. Por tanto, los resultados discrepantes proporcionados por esta técnica geotermométrica en los manantiales de Luchon han de estar factiblemente causados por modificaciones secundarias de la relación de equilibrio  $\delta^{18}\text{O SO}_4 = - \delta^{18}\text{O H}_2\text{O}$  durante el ascenso de las soluciones a la superficie.

Los caracteres composicionales de todas las soluciones tratadas en este estudio permitan considerarlas *a priori* como representativas de los existentes en profundidad. Los buenos resultados obtenidos en todos los casos por las técnicas geotermométricas químicas han confirmado que no se han producido modificaciones secundarias de importancia durante el ascenso de las soluciones termales. Sin embargo, los procesos secundarios que pueden afectar al equilibrio isotópico utilizado en este trabajo son muy variados y de distinta índole a los detectables en los rasgos composicionales de las soluciones (tal como ocurre en Luchon). Su existencia debe ser deducida una vez obtenidos los resultados de su aplicación y, por ello, la utilización de este geotermómetro debe realizarse en combinación con técnicas geotermométricas químicas.

### Agradecimientos

Los autores quieren agradecer a ENHER S.A. la cesión de los datos isotópicos manejados en este trabajo y, específicamente a los Sres. Regué-Godall y Muñiz, las facilidades en la consulta de los archivos sobre las campañas de prospección emprendidas por esa empresa en las manifestaciones termales pirenaicas. Asimismo quieren agradecer al Servei Geològic de Catalunya, en la persona del Sr. Pep Corominas, su ayuda en la revisión de los datos y recopilaciones analíticas existentes en ese organismo.

### Bibliografía

- Arnorsson, S.; Gunnlaugsson, E. y Svavarsson, H. (1983): The chemistry of geothermal waters in Iceland. III. Chemical geothermometry in geothermal investigations. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 47, 567-577.
- Auqué, L.F. (1993). *Estudio de sistemas geotermales en Aragón. Pautas de especiación y reacción aplicadas a la modelización de sistemas de baja-media entalpía*. Tesis Doctoral. Universidad de Zaragoza, 509 pp. (inédita).
- Auqué, L.F.; Mandado, J.; Gimeno, M.J.; López, P.L. y Gómez, J. (1996). Los sistemas geotermales del Pirineo Central. I. Caracteres geoquímicos y fisicoquímicos de los manantiales termales. *Estudios Geológicos*, 52, 345-357.



Auqué, L.F.; Sánchez Cela, V. y Fernández, J.(1986): Métodos geotermométricos en la determinación de la temperatura de base en aguas termales. *Rev. Acad. Ciencias Zaragoza*, 46, 161-172.

Chevalier-Lemire, G.; Pigassou, R.; Rigaiil, R. y Vilms, T. (1990): Étude des variations naturelles du débit des sources thermales à Luchon (Haute-Garonne, France) par modèle hydrologique global pluies-débits. *Hydrogeologie*, 4, 287-296.

Chiba, H. y Sakai, H. (1985): Oxygen isotope exchange rate between dissolved sulfate and water at hydrothermal temperatures. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 49, 993-1000.

Criaud, A. y Vuataz, D. (1984): *Étude géochimique et géothermique des eaux sulfurées sodiques de Luchon, Pyrénées*. Rapport du BRGM 84 SGN 384 IRG, 61 pp.

Fouillac, C.; Fouillac, A.M.; Castagne, J.; Criaud, A.; Vuataz, F.D. y Boulmier, J.L. (1987): *Les isotopes de l'oxygène des sulfates dissous en milieu géothermal. Application à la prospection géothermique*. BRGM Rept. 87 DT 017 ANA.

Fouillac, C.; Fouillac, A.M. y Criaud, A. (1990): Sulphur and oxygen isotopes of dissolved sulphur species in formation waters from Dogger geothermal aquifer, Paris Basin, France. *Applied Geochemistry*, 5, 415-427.

Fournier, R.O. y Truesdell, A.H. (1973). An empirical Na-K-Ca geothermometer for natural waters. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 37, 1255-1275.

Friedman, I. y O'Neil, J.R. (1977): Compilation of stable isotope fractionation factors of geochemical interest. In: *Data on Geochemistry*. (M. Fleicher, ed.). U.S. Geol. Surv. Prof. Paper, 440-KK, 12 pp.

Giggenbach, W.; Gonfiantini, R.; Jangi, B.L. y Truesdell, A.H. (1983): Isotopic and chemical composition of Parbati valley geothermal discharges, N.W. Himalaya. India. *Geothermics*, 12, 199-222.

Lloyd, R.M. (1968): Oxygen isotope behaviour in the sulfate-water system. *J. Geophys. Res.*, 73, 6099-6110.

McKenzie, W.F. y Truesdell, A.H. (1977): Geothermal reservoir temperatures estimated from the oxygen isotope compositions of dissolved sulfate and water from hot springs and shallow drillholes. *Geothermics*, 5, 51-62.

Michard, G. (1983): *Recueil de données thermodynamiques concernant les équilibres eaux-minéraux dans les réservoirs géothermaux*. Rapp. Comm. Eur., Brussels. EUR 8590 FR.

Michard, G. (1990): Behaviour of major elements and some trace elements (Li, Rb, Cs, Sr, Fe, Mn, W y F) in deep hot waters from granitic areas. *Chem. Geol.*, 89, 117-134.

Michard, G. y Fouillac, C. (1980): Contrôle de la composition chimique des eaux thermales sulfurées sodiques du Sud de la France. In: *Géochimie des interactions entre les eaux, les minéraux et les roches*. (Y. Tardy, ed.). Elements, Tarbes, pp. 147-166.



Michard, G. y Roekens, E. (1983): Modelling of the chemical composition of alkaline hot waters. *Geothermics*, 12, 161-169.

Michard, G.; Sanjuan, B.; Criaud, A.; Fouillac, C.; Pentcheva, E.N.; Petrov, P.S. y Alexieva, R. (1986): Equilibria and geothermometry in hot waters from granites of S. W. Bulgaria. *Geochem. J.*, 20, 159-171.

Mizutani, Y. (1972): Isotopic composition and underground temperature of the Otake geothermal water, Kyushu, Japan. *Geochem. J.*, 6, 67-73.

Mizutani, Y. y Rafter, T.A. (1969): Oxygen isotopic composition of sulphates. 3. Oxygen isotopic fractionation in the bisulfate ion-water system. *N.Z.J. Sci.*, 12, 54-59.

O'Neil, L.H.; Adami, L.H. y Epstein, S. (1975): Revised value of the  $^{18}\text{O}$  fractionation between  $\text{CO}_2$  and water at 25 °C. *U.S. Geol. Survey, J. Res.*, 3, 623-624.

Rançon, J.P.; Puvilland, P. y Vuataz, F.D. (1984). *Project géothermique des Escaldes (Andorre). Étude sous-sol.* Rapport BRGM 84 SGN 116 GTH, 59 pp.

Sanjuan, B.; Michard, A. y Michard, G. (1988): Influence of the temperature of  $\text{CO}_2$ -rich springs on their Al and REE contents. *Chem. Geol.*, 68, 57-68.

Soulé, J.-C. (1990): Circulations profondes en milieu granitique: eaux sulfurées des Pyrénées. *Hydrogéologie*, 4, 297-299.

Truesdell, A.H. y Hulston, J.R. (1980). Isotopic evidence on environments of geothermal systems. In: *Handbook of Environmental Isotope Geochemistry* (P. Fritz y J.Ch. Fontes, eds.), vol.1, pp. 179-226.

Vandelannoote, R. (1984): *Trace element geochemistry in thermal waters (E. Pyrénées), 1st Part.* Thesis, Université of Antwerp. Antwerp (unpublished).

## 1. Introduction

El interés por estudiar el origen de aguas calientes y salinas se ha incrementado en los últimos años, debido a la necesidad de encontrar nuevas fuentes de energía y a la importancia de los recursos minerales. La investigación en este campo ha permitido comprender mejor los procesos geológicos que controlan la formación de estas aguas y su relación con la tectónica y la actividad volcánica. En este trabajo se presenta un estudio detallado de las aguas calientes y salinas de la zona de los Pirineos, donde se han identificado varios tipos de sistemas geotérmicos. Se describen las características químicas y isotópicas de estas aguas, así como los modelos propuestos para explicar su origen y evolución. El estudio incluye una revisión de la literatura existente y una comparación de los resultados obtenidos con los de otras zonas geotérmicas.



## Aplicación de la modelización geoquímica al estudio de sistemas salinos continentales: la laguna La Playa (Zaragoza, España)

P.L. López<sup>(1)</sup>, L.F. Auqué<sup>(1)</sup>, J. Mandado<sup>(1)</sup>, V. Vallès<sup>(2)</sup> y M.J. Gimeno<sup>(3)</sup>

<sup>(1)</sup> Área de Petrología y Geoquímica. Depto Ciencias de la Tierra. Fac. Ciencias. Univ. Zaragoza. 50009 - ZARAGOZA (España).

<sup>(2)</sup> Laboratoire de Science du Sol. Inst. National de la Recherche Agronomique. Domaine St. Paul, Site Agroparc. 84914 AVIGNON. CEDEX 9 (France)

<sup>(3)</sup> Programa de Comportamiento Ambiental de Contaminantes Convencionales. Inst. Medio Ambiente - CIEMAT. Av/ Complutense, 22. 28040 - MADRID (España).

### Abstract

*The PHRQPITZ geochemical code (which incorporates a chemical model based on Pitzer's equations) has been used for calculating ionic activities and saturation indexes for a set of brine samples collected at La Playa saline system (Zaragoza, Spain). These solutions are near-neutral brines of the Na-Cl type, and reaching extremely high concentrations (up to 12 molal) along their evaporative evolution.*

*Saturation states calculated by the code have pointed out that all brines sampled were saturated with regard to calcite, gypsum and anhydrite. However, their stability diagram shows that water activity values determine gypsum to be the more stable phase in the  $\text{Ca-SO}_4\text{-H}_2\text{O}$  system for almost all samples. Halite, thenardite and bloedite reach saturation at a late stage during brine evolution. The evolving paths of mirabilite, glauberite, polyhalite and epsomite do not show any evidence of brine-mineral equilibrium process. Nevertheless, mirabilite saturation state should be taken with caution because of the lack of field temperature data.*

*The comparison of these results with the research of Garcés *et al.* (1991, 1992) indicates that Pitzer's formulation is the more adequate approach for the physicochemical treatment of highly concentrated waters.*

### 1. Introducción

El interés que presenta el estudio de sistemas salinos actuales estriba tanto en la obtención de datos que ayuden a comprender los procesos activos en estos medios, como en la aplicación de este conocimiento adquirido a la interpretación de los depósitos salinos de épocas pasadas. El estudio de sistemas salinos en ambientes continentales plantea una serie de inconvenientes entre los que cabe citar los siguientes: la necesidad de un desmuestre espacial y temporal detallado (tanto de salmueras como de sedimentos), para poder así detectar los fenómenos más destacables y determinar su orden cronológico; la delimitación de los efectos causados por los diferentes tipos de procesos, como por ejemplo la modificación de la concentración en solución de un determinado elemento debida bien a



la evaporación o bien a la variación de temperatura (Auqué *et al.*, 1994, 1995); el complicado seguimiento de las etapas finales en las que tiene lugar frecuentemente la desecación de las salmueras, debido a la restricción espacial y a los problemas asociados en el muestreo de las soluciones residuales; y, finalmente, las dificultades que entraña el estudio fisicoquímico de estos sistemas, ya que la elevadísima concentración de las salmueras limita en gran medida la aplicabilidad de los códigos de modelización geoquímica basados en planteamientos clásicos de cálculo de coeficientes de actividad (Garcés *et al.*, 1991).

La resolución de todos estos problemas precisa la combinación de un conocimiento detallado del sistema natural con la información suministrada por el estudio fisicoquímico del mismo (Weare, 1987). La utilización de estas dos metodologías en el estudio de un sistema salino continental permitirá analizar la evolución composicional de las salmueras sometidas a un proceso de concentración por evaporación, y además la secuencia de cristalización de sales que se produce bajo esas condiciones. En concreto, en este artículo se presentan los resultados del tratamiento fisicoquímico llevado a cabo sobre una serie de datos de salmueras correspondientes a la laguna La Playa (provincia de Zaragoza), sistema salino cuyas características hidroquímicas y sedimentológicas se conocen gracias fundamentalmente a los estudios de Pueyo (1978-79, 1980) y Pueyo e Inglès (1987). Las observaciones realizadas por estos autores sobre el propio sistema natural han servido de valiosa referencia a la hora de interpretar los resultados ofrecidos por la modelización geoquímica.

Este trabajo viene a completar además los estudios fisicoquímicos llevados a cabo por Garcés *et al.* (1991, 1992) sobre este mismo sistema salino. Dichos autores realizaron un estudio comparativo de los resultados que se obtenían del tratamiento fisicoquímico de muestras de salmueras mediante distintas formulaciones de cálculo de coeficientes de actividad. En el presente artículo se utiliza una opción de cálculo no contemplada en aquella investigación, lo que va a permitirnos realizar una valoración final de la adecuación de las distintas formulaciones al tratamiento de soluciones de concentración elevada.

## 2. Localización geográfica y características generales

La laguna La Playa se sitúa en la comarca de los Monegros, y pertenece al término municipal de Sástago (provincia de Zaragoza). Forma parte de un conjunto de depresiones cerradas que, ubicadas entre los núcleos de población de Bujaraloz y Sástago, constituyen el área endorreica más importante de la Cuenca del Ebro (figura 1). En esta zona hay aproximadamente un centenar de depresiones, pero sólo algunas presentan actividad evaporítica en la actualidad, permaneciendo las demás secas y colonizadas por vegetación halófila o, en algunos casos, saneadas y ocupadas por campos de cultivo (Pueyo y De la Peña, 1991). Todas estas depresiones se distribuyen sobre una extensa plataforma de relieve muy suavizado, que aparece cubierta por vegetación esteparia y que se eleva unos 200 metros sobre el nivel de base del río Ebro en la zona Sástago-Escatrón. El clima de esta región puede definirse como de tipo mediterráneo con influencia continental, caracterizado por presentar veranos muy calurosos, inviernos fríos y secos y precipitaciones escasas e irregularmente distribuidas, siendo la primavera y el otoño las estaciones más lluviosas.

Los materiales que afloran en el sector central de la cuenca presentan una disposición a grandes rasgos tabular, corresponden principalmente al Oligoceno y Mioceno y son fundamentalmente calcáreos, detríticos (de tamaño de grano medio-fino) y yesíferos. El encajamiento del río Ebro y sus afluentes sobre estos materiales durante el Cuaternario ha individualizado distintas plataformas estructurales en el centro de la cuenca. En la plataforma de Monegros no existe una red hidrográfica superficial definida, y el agua presente en las lagunas procede de la precipitación directa, de pequeñas escorrentías superficiales e hipodérmicas y, finalmente, del aporte de aguas subterráneas. Estudios recientes (García Vera, 1994) ponen de manifiesto la complejidad hidrogeológica del sustrato de esta



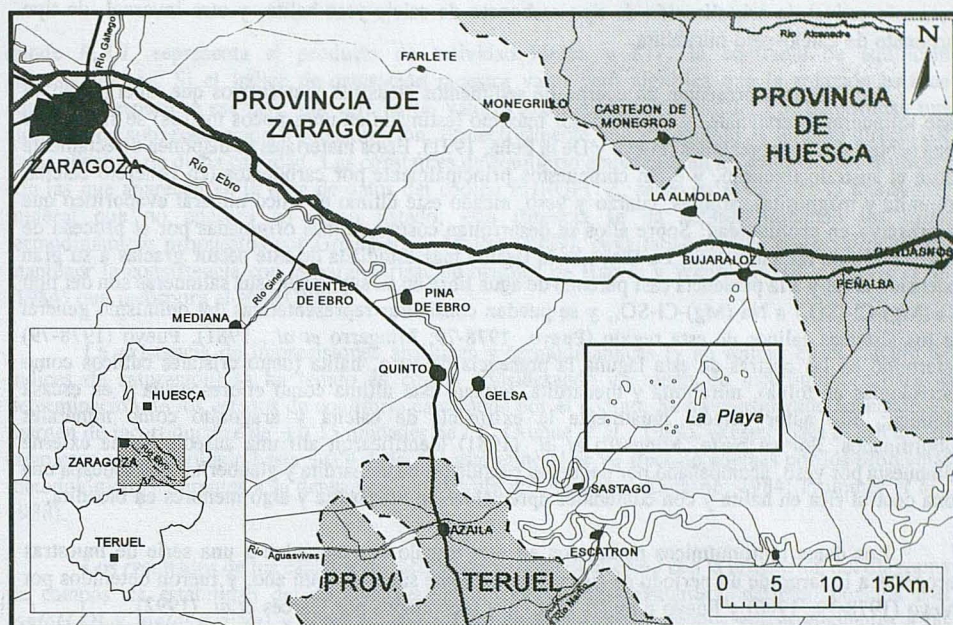


Figura 1.- Mapa de situación geográfica de la laguna La Playa. La zona enmarcada delimita el núcleo del foco endorreico ubicado entre las poblaciones de Bujaraloz y Sástago (provincia de Zaragoza).

plataforma, derivada directamente de la elevada heterogeneidad, tanto en la horizontal como en la vertical, de la distribución de litologías. García Vera (1994) distingue en su trabajo dos niveles acuíferos, uno de los cuales discurre a través de la Unidad Lacustre Intermedia y cuya zona de descarga se sitúa en el foco endorreico de Bujaraloz-Sástago, donde se encuentra enclavada la laguna La Playa. Algunas de estas depresiones presentan salmueras superficiales de elevada salinidad, que evolucionan según un proceso de concentración por evaporación debido a la marcada aridez del clima.

El contenido salino de las lagunas procede del aporte por lixiviación de los materiales solubles del sustrato terciario, y sufre un reciclado anual como consecuencia de la propia estacionalidad del clima. La evolución geoquímica de las salmueras está sujeta a la acción opuesta de dos procesos (Pueyo, 1978-79): por un lado, un aumento progresivo en la concentración de solutos como respuesta a la evaporación; y por otro, la disminución relativa en el contenido de determinados elementos al verse involucrados en reacciones de precipitación salina, en procesos biológicos y en fenómenos de adsorción sobre partículas arcillosas.

Estas depresiones que albergan salmueras en su interior pueden considerarse como sistemas activos de *playa-lake*, aunque la reducida extensión areal tanto de las propias lagunas como de sus respectivas cuencas de drenaje han provocado una escasa diferenciación en subambientes, siendo los mejor representados aquellos que corresponden a las zonas más internas del sistema (Pueyo, 1978-79) y que según la terminología de Hardie *et al.* (1978) son: lago salino (*inner salt pan*), llanura fangosa salina (*outer saline mudflat*) y, con menor frecuencia, llanura fangosa seca (*dry mudflat*). La evolución de los cuerpos de agua superficiales depende fundamentalmente de los factores climáticos, que ejercen un control directo sobre la presencia, extensión areal y persistencia temporal de la lámina de agua libre. La precipitación salina en las lagunas se produce por cristalización directa a partir de las salmueras libres, pero también se pueden formar eflorescencias superficiales como consecuencia



del bombeo evaporítico de salmueras intersticiales. En los estudios realizados sobre la precipitación salina en esta zona se determinó un comportamiento estacional (Pueyo, 1978-79), diferenciándose una secuencia estival de cristalización de tipo carbonato de calcio-yeso-halita, y otra invernal, de tipo carbonato de calcio-yeso-mirabilita.

Estas lagunas presentan un cuerpo de sedimentos lacustres cuaternarios que albergan en su seno salmueras intersticiales y cuyo espesor máximo (estimado en unos pocos metros) se sitúa en la zona central de las depresiones (Pueyo y De la Peña, 1991). Estos materiales se disponen directamente sobre el sustrato terciario, y están compuestos principalmente por carbonatos (en concreto calcita, dolomita y magnesita), arcillas, cuarzo y yeso, siendo este último el único mineral evaporítico que se preserva en profundidad. Sobre ellos se desarrollan costras salinas originadas por el proceso de evaporación de las salmueras. La Playa es la laguna más estudiada de este sector gracias a su gran extensión areal y a la presencia casi perenne de agua libre en su superficie; sus salmueras son del tipo Na-(Mg)-Cl-(SO<sub>4</sub>) a Na-(Mg)-Cl-SO<sub>4</sub>, y se pueden considerar representativas del quimismo general de los sistemas salinos de esta región (Pueyo, 1978-79; Mingarro *et al.*, 1981). Pueyo (1978-79) determinó en las costras de esta laguna la presencia de yeso, halita (tanto cristales cúbicos como morfologías en tolva), mirabilita y thenardita, aunque esta última como eflorescencia y en escasa cantidad; este autor detectó igualmente la existencia de calcita y aragonito como minerales subordinados. Por su parte, Mingarro *et al.* (1981) identificaron allí una aureola salina externa compuesta por yeso, acompañado por pequeñas cantidades de thenardita y glauberita, que rodeaba una zona central rica en halita y con contenidos apreciables en thenardita y algo menores en bloedita.

Los datos hidroquímicos manejados en este trabajo corresponden a una serie de muestras recogidas a lo largo de un periodo de tiempo ligeramente superior a un año, y fueron obtenidos por Pueyo (1978-79, 1980) y Pueyo e Inglès (1987), y recopilados por Garcés *et al.* (1992).

### 3. Metodología

La utilización de técnicas de modelización geoquímica en la investigación de un sistema hidroquímico va encaminada principalmente al estudio evolutivo de los principales parámetros fisicoquímicos. Para ello es necesario un modelo químico capaz de describir con precisión las propiedades termodinámicas de las soluciones acuosas. Las características intrínsecas del sistema estudiado suelen imponer restricciones a la hora de escoger los códigos de modelización geoquímica más adecuados; en el caso de un sistema salino como el que aquí se analiza, la elevada concentración de las soluciones impide la utilización de los clásicos modelos de Asociación Iónica basados en la ecuación de Debye-Hückel para determinar los coeficientes de actividad de las especies disueltas (Garcés *et al.*, 1991, 1992), y calcular posteriormente con precisión los productos de actividad iónica correspondientes a las fases minerales involucradas (Auqué *et al.*, 1994).

Para llevar a cabo los cálculos fisicoquímicos sobre las salmueras de La Playa se ha utilizado el código PHRQPITZ (Plummer *et al.*, 1988), y la metodología empleada es idéntica a la presentada en Auqué *et al.* (1994). Dicho código incorpora y amplía a rangos de temperaturas entre 0 y 60° C el modelo de interacciones iónicas o de coeficientes viriales de Pitzer (1973), con los parámetros obtenidos por Harvie y colaboradores (Harvie y Weare, 1980; Harvie *et al.*, 1984) para el sistema Na-K-Mg-Ca-H-Cl-SO<sub>4</sub>-OH-HCO<sub>3</sub>-CO<sub>3</sub>-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O, inicialmente válido sólo a 25° C. El código utiliza las concentraciones de los componentes analizados para calcular las actividades iónicas individuales y determinar el grado de saturación de la solución respecto a distintas fases minerales. La evaluación del estado de saturación de las salmueras frente a las fases minerales seleccionadas se ha llevado a cabo calculando los índices de saturación (*I.S.*) mediante la expresión:



$$I.S. = \log \frac{P.A.I.}{K(T)}$$

donde *P.A.I.* representa el producto de actividad iónica y *K(T)* la constante de equilibrio correspondiente. Si el índice de saturación muestra valor cero significa que la solución está en equilibrio respecto a esa fase; por otra parte, valores positivos o negativos del *I.S.* determinan una situación de sobresaturación o subsaturación, respectivamente, cuya magnitud es función directa del valor absoluto de dicha cantidad. Las constantes de equilibrio empleadas en los cálculos de saturación son las que aparecen en la base de datos del código PHRQPITZ, salvo en el caso de la thenardita, mineral que no aparece en dicho listado; esta carencia se ha suplido tomando los datos termodinámicos propuestos por Greenberg y Moller (1989), cuya tabulación se realizó procurando mantener la consistencia con la parametrización original de Harvie y Weare (1980) y Harvie *et al.* (1984) que incorpora el PHRQPITZ.

La existencia de imprecisiones analíticas y termodinámicas (y su reflejo en el cálculo de índices de saturación) se ha tenido en cuenta considerando un rango de incertidumbre para la determinación de los estados de equilibrio calculados por el código. Se ha considerado adecuado un margen de incertidumbre de  $\pm 0.15$  unidades de *I.S.* (Auqué *et al.*, 1994), excepto para la calcita, en cuyo caso se ha ampliado hasta  $\pm 0.4$  dado que este mineral se ve afectado además por los problemas metodológicos inherentes a la determinación del pH en salmueras (Dickson, 1984; Plummer *et al.*, 1988).

Los resultados de los cálculos de saturación se han completado con la utilización del diagrama de campos de estabilidad del sistema yeso/anhidrita/mirabilita/thenardita, definido por los ejes  $\log(aH_2O)$  y  $\log(aCa/a^2Na)$  y sobre el que se han representado los puntos correspondientes a las muestras analizadas.

Es necesario señalar que la serie de datos analíticos empleada en este artículo presenta varias deficiencias que ha habido que subsanar para poder realizar el tratamiento mediante el código PHRQPITZ: no existen medidas de temperatura de campo ni densidad para ninguna muestra, y además en algunas de ellas no se dispone del dato de pH y/o alcalinidad. La temperatura de campo no es un dato de importancia capital en un estudio descriptivo clásico de medios salinos, aunque su desconocimiento puede llevar a la obtención de resultados erróneos en los cálculos de saturación para determinadas fases minerales (p. ej.: mirabilita; Auqué *et al.*, 1995); en este caso se ha decidido asignar una temperatura de 25° C para todas las muestras, pero esta simplificación se tendrá en cuenta a la hora de interpretar los resultados obtenidos. La ausencia de datos de densidad supone una deficiencia importante cuando se trabaja con soluciones de concentración elevada. La estructura del código PHRQPITZ (y también de otros muchos códigos de modelización geoquímica) obliga a realizar los cálculos tomando siempre como referencia 1 kg de agua solvente, lo que hace imprescindible la utilización del dato de densidad de las salmueras; en este caso se ha optado por realizar un cálculo teórico de este parámetro mediante el programa SOLDEN (Veintemillas *et al.*, 1994; en Sánchez Moral, 1994), que utiliza para ello la ecuación de Redlich y Meyer (1964; en Sánchez Moral, 1994), basada en la relación existente entre la densidad de una solución y su volumen molar aparente.

Finalmente, la inexistencia de datos de pH y/o alcalinidad en varias muestras se ha salvado asignando valores procedentes de salmueras de concentración similar de la misma serie de datos. El error cometido en este caso no se presume importante, ya que las salmueras de La Playa pertenecen al tipo neutro, según Eugster y Hardie (1978), caracterizado por poseer valores de pH entre 7 y 8.5 aproximadamente, y además por presentar un contenido muy bajo en  $HCO_3^-$  (especie que contribuye de forma mayoritaria a la alcalinidad en salmueras neutras con concentraciones muy bajas de boro y sílice) tras la fase inicial de precipitación de carbonatos de calcio.



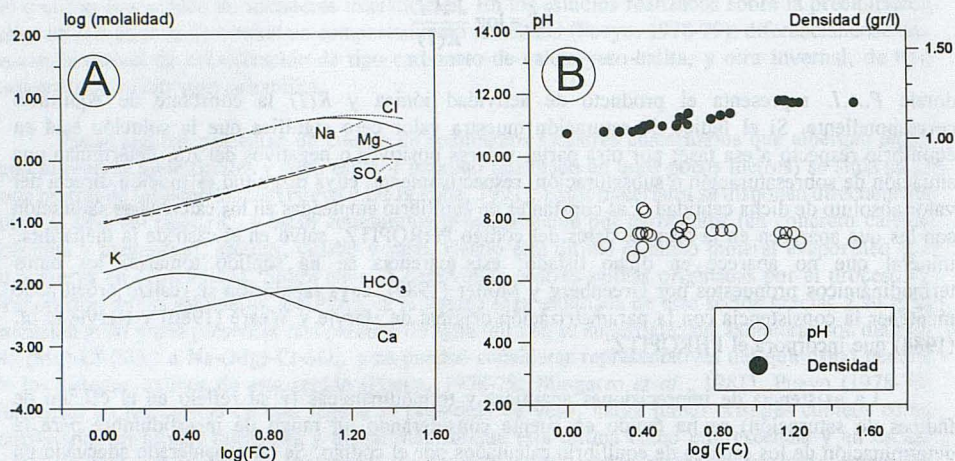


Figura 2.- Diagramas de evolución de composición iónica (A) y pH y densidad (B) de las salmueras de La Playa, en función del factor de concentración.

#### 4. Evolución del quimismo de las salmueras

Para analizar la evolución de las concentraciones elementales, del pH y densidad de las salmueras, se ha estimado conveniente determinar una variable indicativa del grado de avance del proceso evaporativo. Para ello se ha seleccionado el potasio como elemento cuyo comportamiento puede considerarse conservativo (o sea, que no se ve involucrado, al menos *a priori*, en ninguna reacción de precipitación ni disolución mineral en la escala estudiada del proceso; Eugster y Jones, 1979), calculándose el factor de concentración (FC) como el cociente entre el contenido en potasio en cada muestra y el correspondiente al estadio de mayor dilución del sistema. Las pautas evolutivas así obtenidas se han representado en la figura 2. En el diagrama de concentraciones (figura 2A) se aprecia una pauta ascendente para Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> y Cl<sup>-</sup>, aunque en la etapa final tiene lugar un descenso en el contenido en Cl<sup>-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> y Na<sup>+</sup>, siendo más acusado el de este último. La evolución de Ca<sup>2+</sup> y HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> es bastante irregular, combinando en ambos casos una tendencia ascendente inicial con otra descendente en etapas más avanzadas. En el diagrama se han representado los suavizados polinómicos en lugar de las nubes de puntos para facilitar de esta manera la visualización de las tendencias evolutivas. Por otra parte, en la figura 2B se aprecia una evolución ligeramente descendente para el pH (cuyos valores se sitúan siempre entre 8 y 7.5) y ascendente en el caso de la densidad, aunque este último parámetro tiende a estabilizarse en las etapas más avanzadas del proceso.

#### 5. Resultados de la modelización geoquímica

La fuerza iónica de las soluciones (parámetro que calcula el código, y que se utiliza frecuentemente como expresión global de la concentración de una salmuera) aumenta de forma constante desde un valor inicial ligeramente superior a 1 molal hasta alcanzar una concentración final próxima a 12 molal, como se puede observar en la figura 3. Esta circunstancia justifica sobradamente la elección de un código de modelización que emplea las ecuaciones de Pitzer para el cálculo de coeficientes de actividad, ya que es el planteamiento que actualmente permite obtener los resultados más aceptables en estas condiciones. En el mismo gráfico se ha representado la actividad del agua,



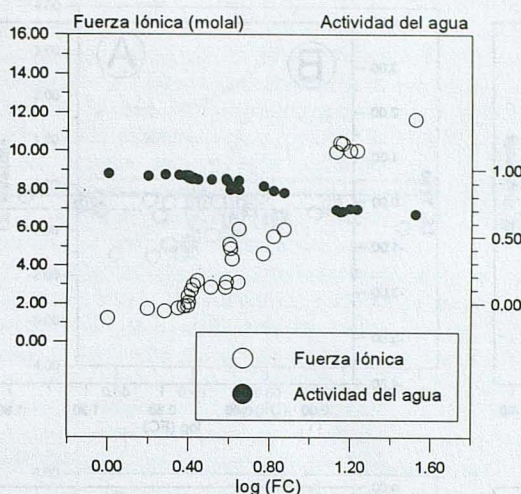


Figura 3.- Diagrama de evolución de fuerza iónica y actividad del agua de las salmueras de La Playa, en función del factor de concentración.

un momento determinado (figura 4C), situación que se mantiene a partir de entonces hasta las últimas muestras recogidas.

En la figura 5 se han representado los índices de saturación correspondientes a varios minerales sulfatados que han sido detectados en depósitos salinos y en costras eflorescentes de lagunas de la región de Monegros. Los resultados relativos a la mirabilita (sulfato sódico decahidratado; figura 5A) indican una situación de subsaturación para todas las muestras aunque llegan a situarse muy próximas al equilibrio. Por su parte, la fase de sulfato sódico anhidro (thenardita; figura 5B) muestra una evolución muy similar a la descrita para la halita, alcanzando ambos minerales el equilibrio de manera prácticamente simultánea; una situación casi idéntica se observa en el caso de la bloedita (figura 5D), sal sulfatada doble de sodio y magnesio que suele asociarse generalmente a costras eflorescentes. El resto de fases minerales representadas no muestra un comportamiento que permita identificar una situación de equilibrio para el intervalo registrado del proceso. Así, glauberita (figura 5C) y polihalita (figura 5F) pasan de un estado de subsaturación a otro de sobresaturación sin experimentar aparentemente ningún cambio de comportamiento en las proximidades de la zona de equilibrio. Finalmente, la epsomita (figura 5E) no llega a alcanzar el equilibrio, aunque la última muestra se queda muy próxima a la saturación.

La proyección de las muestras sobre el diagrama de campos de estabilidad de fases (determinado por los ejes  $\log(aH_2O)$  y  $\log(aCa/a^2Na)$ ; figura 6) permite establecer que el yeso es la fase estable de sulfato cálcico a lo largo de la mayor parte del proceso, a pesar de que existe también una situación de equilibrio aparente respecto a anhidrita. En este diagrama se observa que los puntos correspondientes a las muestras analizadas evolucionan dentro del campo correspondiente al yeso, alcanzando finalmente el de la thenardita tras atravesar el de la anhidrita durante un breve lapso del proceso. También se comprueba cómo la mirabilita no llega a ser estable en ningún momento de la evolución, hecho que se ajusta a los cálculos de saturación mineral.

parámetro igualmente calculado por el PHRQPITZ y cuyo valor descende desde 1 hasta prácticamente 0.7 en las etapas finales.

El cálculo de los índices de saturación para las fases minerales más relevantes y su representación en función del factor de concentración (figuras 4 y 5) ha permitido estimar la evolución de las condiciones de equilibrio mineral en las salmueras de La Playa. Las soluciones se encuentran en todo momento muy próximas a la saturación con calcita, aunque en un principio están ligeramente sobresaturadas (figura 4A), y existe también una situación clara de equilibrio respecto a yeso y anhidrita que se mantiene prácticamente a lo largo de todo el proceso (figuras 4B y 4D). Por su parte, la halita aparece marcadamente subsaturada y alcanza el equilibrio en



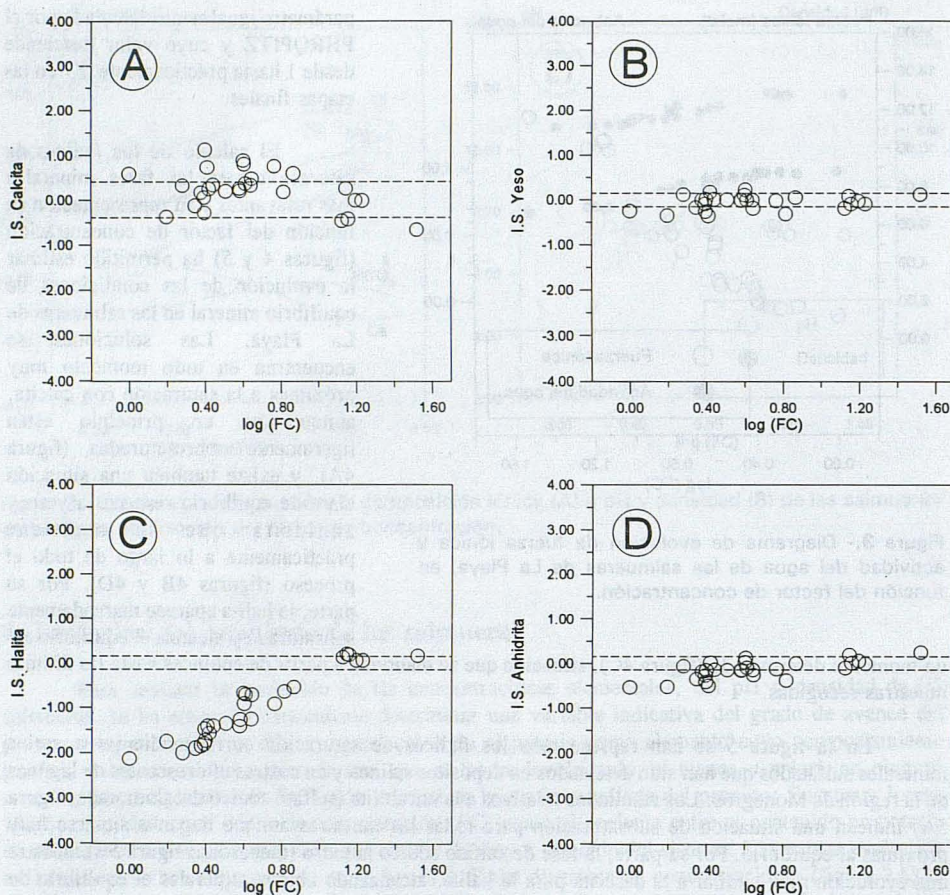


Figura 4.- Evolución de los índices de saturación (I.S.) calculados por el código PHRQPITZ en las salmueras de La Playa para calcita (A), yeso (B), halita (C) y anhídrita (D).

## 6. Discusión de los resultados obtenidos

Los resultados alcanzados mediante la modelización geoquímica permiten establecer una secuencia evolutiva de precipitación salina para las salmueras de La Playa. Estas soluciones se mantienen en una situación de equilibrio con calcita, yeso y anhídrita para todas las muestras analizadas, aunque de entre las fases consideradas de sulfato cálcico únicamente el yeso es estable. El estudio fisicoquímico ha permitido además evidenciar que, en las etapas de concentración más elevada, otros minerales como halita, thenardita y bloedita parecen verse afectados por un proceso de equilibrio mineral que queda reflejado en la evolución de sus índices de saturación. De la misma manera, los cálculos realizados indican que mirabilita, glauberita, polihalita y epsomita no llegan a delinear una pauta evolutiva que denote la existencia de equilibrio mineral entre la salmuera y estas fases salinas.

La sedimentación salina que tiene lugar en la laguna La Playa (según los estudios de Pueyo, 1978-79, Pueyo e Inglès, 1987, y Mingarro *et al.*, 1981) consiste en una secuencia de precipitación bajo lámina de agua en la que, tras una etapa inicial de formación de carbonatos de calcio, tiene lugar



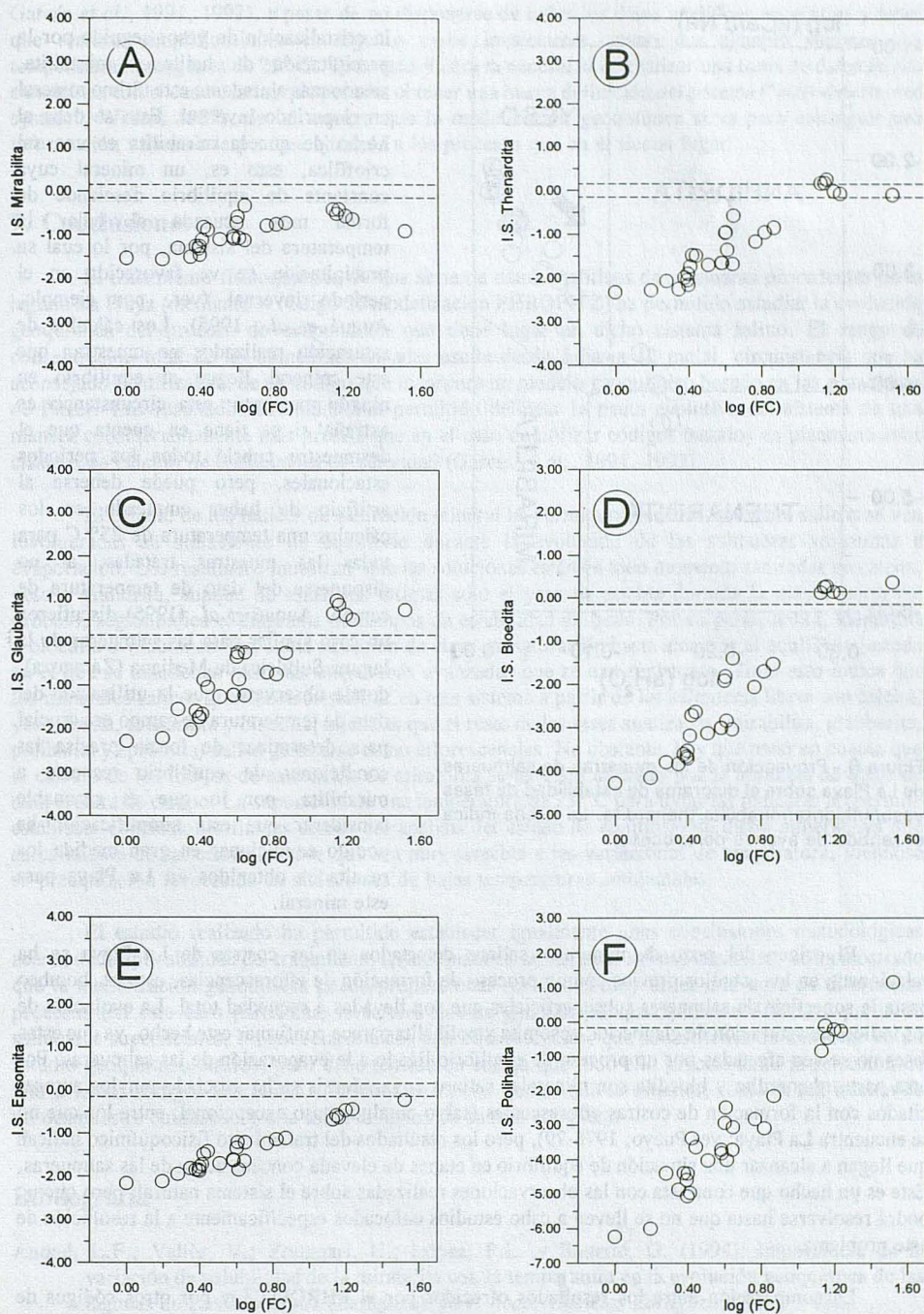


Figura 5.- Evolución de los índices de saturación (I.S.) calculados por el código PHRQPITZ en las salmueras de La Playa para mirabilita (A), thenardita (B), glauberita (C), bloedita (D), epsomita (E) y polihalita (F).



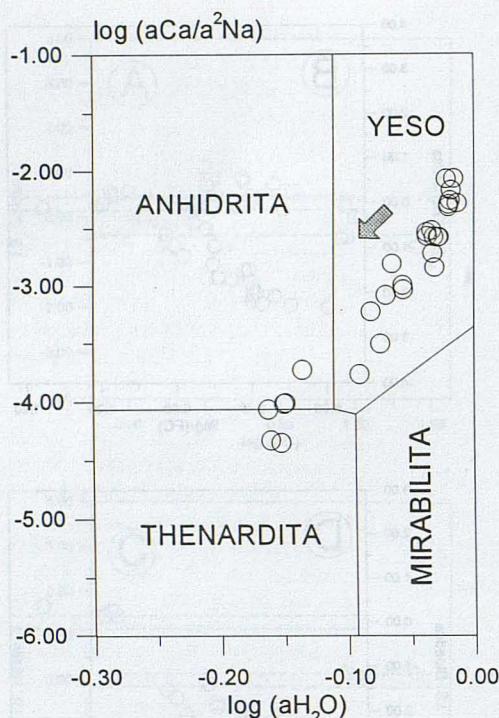


Figura 6.- Proyección de las muestras de salmuera de La Playa sobre el diagrama de estabilidad de fases yeso/anhidrita/mirabilita/thenardita. La flecha indica el sentido de avance del proceso.

la cristalización de yeso, seguido por la precipitación de halita y mirabilita, siendo más abundante este último mineral en el periodo invernal. Esto se debe al hecho de que la mirabilita es una sal crioílica, esto es, un mineral cuya constante de equilibrio desciende de forma muy acusada al bajar la temperatura del sistema, por lo cual su precipitación se ve favorecida en el periodo invernal (ver, por ejemplo, Auqué *et al.*, 1995). Los cálculos de saturación realizados no muestran que este mineral llegue al equilibrio en ningún momento; esta circunstancia es extraña si se tiene en cuenta que el desmuestre cubrió todos los periodos estacionales, pero puede deberse al artificio de haber empleado en los cálculos una temperatura de 25° C para todas las muestras tratadas, al no disponerse del dato de temperatura de campo. Auqué *et al.* (1995) discutieron un caso similar para las salmuera de la laguna Sulfúrica de Mediana (Zaragoza), donde observaron que la utilización del dato de temperatura de campo era crucial para determinar de forma precisa las condiciones de equilibrio respecto a mirabilita, por lo que es razonable considerar que esta simplificación ha podido condicionar en gran medida los resultados obtenidos en La Playa para este mineral.

El origen del resto de minerales salinos detectados en las costras de La Playa se ha relacionado en los estudios previos con un proceso de formación de eflorescencias, esto es, bombeo hasta la superficie de salmuera subsuperficiales que son llevadas a sequedad total. La evolución de los índices de saturación de glauquerita, epsomita y polihalita parece confirmar este hecho, ya que estas fases no se ven afectadas por un proceso de equilibrio ligado a la evaporación de las salmuera. Por otra parte, thenardita y bloedita son minerales salinos cuya génesis se ha asociado por los autores citados con la formación de costras eflorescentes (salvo en algún caso excepcional, entre los que no se encuentra La Playa; ver Pueyo, 1978-79), pero los resultados del tratamiento fisicoquímico indican que llegan a alcanzar una situación de equilibrio en etapas de elevada concentración de las salmuera. Este es un hecho que contrasta con las observaciones realizadas sobre el sistema natural, pero que no podrá resolverse hasta que no se lleven a cabo estudios enfocados específicamente a la resolución de este problema.

La comparación entre los resultados ofrecidos por el PHRQPITZ y por otros códigos de modelización (Garcés *et al.*, 1991, 1992) sobre los mismos datos analíticos muestra la mejor adecuación del primero para el tratamiento de salmuera de concentración muy elevada. Este hecho se ve materializado tanto en la delineación de pautas evolutivas bastante más continuas, como en la mejor delimitación de las situaciones de equilibrio mineral (ver los gráficos correspondientes en



Garcés *et al.*, 1991, 1992), a pesar de no disponerse de todos los datos analíticos necesarios y tener que realizar simplificaciones en algunos casos importantes, como por ejemplo suponer una temperatura homogénea de 25° C. Todo esto ilustra la necesidad de realizar una toma de datos *in situ* simultánea con el desmuestre, que permita obtener una buena definición del sistema ("well-determined system"; Weare, 1987), de tal manera que la modelización geoquímica sirva para conseguir una información valiosa a la par que ajustada a los procesos que en él tienen lugar.

## 7. Conclusiones

El tratamiento fisicoquímico de una serie de datos analíticos de salmueras procedentes de la laguna La Playa (mediante el código de modelización PHRQPITZ) ha permitido estudiar la evolución geoquímica del proceso de evaporación que tiene lugar en dicho sistema salino. El rango de concentración total de las soluciones tratadas oscila desde 1 hasta 12 molal, circunstancia que ha aconsejado la utilización de un código que incorpore un modelo geoquímico basado en las ecuaciones de Pitzer. Los resultados obtenidos han permitido delinear la pauta evolutiva del sistema de una manera considerablemente más precisa que en el caso de utilizar códigos basados en planteamientos clásicos de cálculo de coeficientes de actividad (Garcés *et al.*, 1991, 1992).

El cálculo de los índices de saturación mineral ha permitido discernir qué fases salinas se ven involucradas en situaciones de equilibrio durante la evolución de las salmueras sometidas a evaporación. Los resultados muestran que las soluciones están en todo momento saturadas en calcita, yeso y anhidrita, aunque de estas dos últimas sólo el yeso es estable durante la mayor parte del proceso, según indica el diagrama de campos de estabilidad de fases. Por su parte, halita, thenardita y bloedita evolucionan desde una situación de clara subsaturación hasta alcanzar el equilibrio, estado en el que se mantienen hasta las etapas más avanzadas que se han registrado. Todo esto indica que los minerales salinos que deben cristalizar en este sistema a partir de las salmueras libres son calcita, yeso, halita, thenardita y bloedita, mientras que el resto de las fases analizadas (mirabilita, glauberita, polihalita y epsomita) deben generarse como eflorescencias. No obstante, hay que tener en cuenta que el cálculo de los índices de saturación de mirabilita se ha visto afectado por la ausencia de datos de temperatura de campo. La suposición de una temperatura de 25° C para todas las muestras no permite establecer conclusiones fiables acerca del análisis del estado de equilibrio de dicho mineral, ya que su condición de sal crioeflica hace que sea muy sensible a las variaciones de temperatura, viéndose su precipitación favorecida en situaciones de bajas temperaturas ambientales.

El estudio realizado ha permitido establecer igualmente unas conclusiones metodológicas acerca de la aplicabilidad del tratamiento termodinámico en sistemas salinos naturales. Se ha mostrado que la modelización geoquímica puede proporcionar resultados muy útiles a la hora de diferenciar procesos (en este caso particular, minerales que se generan por precipitación directa a partir de salmueras superficiales, o bien relacionados con eflorescencias) que son difíciles de discernir en un estudio geoquímico clásico, pero debe tenerse en cuenta que todo ello precisa tanto la selección de uno o varios códigos adecuados al sistema particular que se quiere estudiar, como la realización de un desmuestre cuidadoso y una toma de datos de campo completa.

## Bibliografía

- Auqué, L.F.; Vallès, V.; Zouggar, H.; López, P.L. y Bourrié, G. (1994): Importancia de la variación de solubilidad de la mirabilita con la temperatura en la evolución geoquímica de las lagunas de Los Monegros (Zaragoza). *Rev. Acad. Ciencias Zaragoza*, 49: 177-189.
- Auqué, L.F.; Vallès, V.; Zouggar, H.; López, P.L. y Bourrié, G. (1995): Geoquímica de las lagunas saladas de Los Monegros (Zaragoza). I. Determinación experimental del reequilibrio mirabilita-solución con la temperatura en un sistema natural. *Estudios Geol.*, 51: 243-257.



- Dickson, A.G. (1984): pH scales and proton-transfer reactions in saline media such as sea water. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 48: 2299-2308.
- Eugster, H.P. y Hardie, L.A. (1978): Saline Lakes. In: *Physics and Chemistry of Lakes* (A. Lerman, Ed.): 237-293. Springer Verlag.
- Eugster, H.P. y Jones, B.F. (1979): Behavior of major solutes during closed-basin brine evolution. *Amer. J. Sci.*, 279: 609-631.
- Garcés, I.; Tena, J.M.; Auqué, L.F.; Gimeno, M.J. y Mandado, J. (1991): Variación de los índices de saturación en función del cálculo de coeficientes de actividad. Su aplicación a las fases mineralógicas de las lagunas de Monegros (Zaragoza, España). *Estudios Geol.*, 47: 305-315.
- Garcés, I.; Tena, J.M.; Auqué, L.F.; Mandado, J. y Gimeno, M.J. (1992): Evolución geoquímica de las salmueras de las lagunas de Monegros (Zaragoza, España) y análisis del equilibrio de la halita. *Estudios Geol.*, 48: 101-110.
- García Vera, M.A. (1994): *Hidrogeología de zonas endorreicas en climas semiáridos: Aplicación a Los Monegros (Zaragoza)*. Tesis Doctoral (inérita). Univ. Politécnica de Cataluña. 347 págs.
- Greenberg, J.P. y Moller, N. (1989): The prediction of mineral solubilities in natural waters: A chemical equilibrium model for the Na-K-Ca-Cl-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O system to high concentration from 0 to 250° C. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 53: 2503-2518.
- Hardie, L.A.; Smoot, J.P. y Eugster, H.P. (1978): Saline lakes and their deposits: A sedimentological approach. In: *Modern and Ancient Lake Sediments* (A. Matter y M.E. Tucker, Eds.). Spec. Publs. Int. Ass. Sediment., 2: 7-41.
- Harvie, C.E.; Moller, N. y Weare, J.H. (1984): The prediction of mineral solubilities in natural waters: The Na-K-Mg-Ca-H-Cl-SO<sub>4</sub>-OH-HCO<sub>3</sub>-CO<sub>3</sub>-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O system to high ionic strengths at 25° C. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 48: 723-751.
- Harvie, C.E. y Weare, J.H. (1980): The prediction of mineral solubilities in natural waters: The Na-K-Mg-Ca-Cl-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O system from zero to high concentration at 25° C. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 44: 981-997.
- Mingarro, F.; Ordóñez, S.; López de Azcona, M.C. y García del Cura, M.A. (1981): Sedimentología de las lagunas de Los Monegros su entorno geológico. *Bol. Geol. Min.*, 92: 171-195.
- Pitzer, K.S. (1973): Thermodynamics of electrolytes. I. Theoretical basis and general equations. *J. Phys. Chem.*, 77: 268-277.
- Plummer, L.N.; Parkhurst, D.L.; Fleming, G.W. y Dunkle, S.A. (1988): *A computer program incorporating Pitzer's equations for calculation of geochemical reactions in brines*. U.S.G.S., Water Resources Invest. Rep. 88-4153.
- Pueyo, J.J. (1978-79): La precipitación evaporítica actual en las lagunas saladas del área: Bujaraloz, Sástago, Caspe, Alcañiz y Calanda (provincias de Zaragoza y Teruel). *Rev. Inst. Inv. Geol. Dip. Prov. Barcelona*, nº 33: 5-56.
- Pueyo, J.J. (1980): Procesos diagenéticos observados en las lagunas tipo playa de la zona Bujaraloz-Alcañiz (provincias de Zaragoza y Teruel). *Rev. Inst. Inv. Geol. Dip. Prov. Barcelona*, nº 34: 195-207.
- Pueyo, J.J. y De la Peña, J.A. (1991): Los lagos salinos españoles. Sedimentología, hidroquímica y diagénesis. In: *Génesis de Formaciones Evaporíticas. Modelos Andinos e Ibéricos* (J.J. Pueyo, Ed.): 163-192. Univ. Barcelona.
- Pueyo, J.J. e Inglès, M. (1987): Substrate mineralogy, pore brine compositions and diagenetic processes in the playa lakes of Los Monegros and Bajo Aragon, Spain. In: *Geochemistry and Mineral Formation in the Earth Surface* (R. Rodríguez-Clemente e Y. Tardy, Eds.): 351-372.
- Sánchez Moral, S. (1994): *Sedimentación salina actual en un lago continental (laguna de Quero, Toledo). Aplicación de la modelización termodinámica al estudio de secuencias de precipitación salina*. Tesis Doctoral (inérita). Univ. Complutense, Madrid, 391 págs.
- Weare, J.H. (1987): Models of mineral solubility in concentrated brines with application to field observations. In: *Thermodynamic Modeling of Geochemical Materials: Minerals, Fluids and Melts* (I.S.E. Carmichael y H.P. Eugster, Eds.). *Reviews in Mineralogy*, 17: 143-176. Mineralogical Society of America.



## Registro fósil de vertebrados en el tránsito Jurásico-Cretácico de Galve (Teruel, España)

J. I. Canudo <sup>1</sup>, G. Cuenca-Bescós <sup>2</sup>, J. I. Ruiz-Omeñaca <sup>2</sup>  
y A. R. Soria <sup>3</sup>

1: Museo Paleontológico de la Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza

2: Departamento de Ciencias de la Tierra (Paleontología), Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza

3: Departamento de Ciencias de la Tierra (Estratigrafía), Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza

**Abstract:** Sediments of continental and shallow marine transitional origin are located in the Galve syncline (Teruel, Spain). The sequence represents the Upper Jurassic-Lower Cretaceous (Tithonian-Barremian) interval. Several vertebrate localities are found throughout the whole sequence. The vertebrate fauna is represented by Pycnodontiformes, Semionotiformes, Amiiformes, Hybodontiformes, Rajiformes, Lamniformes, among "pisces", Quelonía, Pterosauria, Crocodylia, Ornithischia, Saurischia and Sauria among Reptilia and Mammalia. Nearly all the rests are isolated bones and teeth in different stages of preservation. There are also dinosaur tracks in two different levels and reptile eggshells located in the lower layers of the Galve sequence.

### 1. Introducción.

El objetivo de este trabajo es en primer lugar situar estratigráficamente los yacimientos de vertebrados del tránsito Jurásico-Cretácico en Galve (Teruel, España, Fig. 1). Hacer precisiones tafonómicas y paleoecológicas de los restos fósiles de estos yacimientos y poner al día la lista faunística incluyendo los últimos descubrimientos. Estos datos nos permiten realizar un análisis de estas faunas desde la perspectiva de la evolución de los ecosistemas terrestres del tránsito Jurásico - Cretácico en Galve

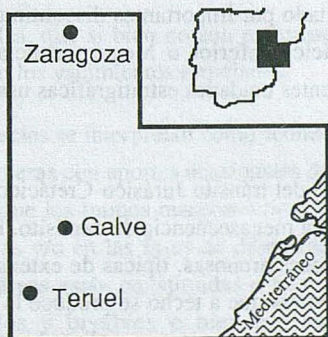


Fig. 1:  
Situación geográfica de Galve



Los yacimientos de vertebrados continentales de la base del Cretácico Inferior son escasos, a nivel mundial. En el Jurásico Superior el registro de reptiles y mamíferos se conoce relativamente bien, gracias a los yacimientos de Norteamérica y de Asia, sin embargo el tránsito entre el Jurásico y el Cretácico es un intervalo con escaso registro en estas dos áreas. El panorama es diferente en España (fundamentalmente en la Cordillera Ibérica) donde afloran materiales en facies "Weald" con un desarrollo de varios miles de metros de potencia. Aunque hay numerosas discontinuidades, está prácticamente representado todo el intervalo que comprende desde el Berriasiense hasta el Aptiense.

## 2. Contexto estratigráfico y paleogeográfico

El área de Galve se sitúa en el extremo occidental de la subcuenca de Galve y conforma una estructura sinclinal (Fig. 2), que afecta a una sucesión de materiales de casi 1000 metros de espesor correspondientes al Jurásico y al Cretácico Inferior (Soria *et al.*, 1995; Canudo *et al.*, 1996). En la década de los ochenta se realizó un estudio estratigráfico y sedimentológico detallado (Díaz-Molina *et al.*, 1984, 85; Díaz-Molina y Yébenes, 1987), aparte de las síntesis de la Serie Magna tanto a escala 1:50.000, como a escala 1:200.000. Estos autores describen con gran precisión las características litológicas de las unidades neocomienses objeto de estudio de este trabajo e identifican, para el Cretácico Inferior de este sector, cuatro unidades estratigráficas (unidades 3, 4, 5 y 6). Las unidades 3 y 4 corresponden a la Fm. Castellar, la unidad 5 a la Fm. Camarillas y la unidad 6 a la Fm. Artoles.

A lo largo de la secuencia Titónico-Berriasiense hay una transición gradual desde plataformas marinas carbonatadas someras (Formación Higuieruelas) a medios submareales, intermareales y supramareales de la Formación Villar del Arzobispo (Fig. 2). El límite de esta secuencia viene marcado por una discontinuidad con laguna estratigráfica que abarca el menos desde el Berriasiense superior al Hauteriviense no terminal. Esta discontinuidad se manifiesta como una discordancia angular de bajo ángulo y un importante cambio litológico y sedimentológico. El registro sedimentario correspondiente al Cretácico Inferior del Área Ibérica, constituye un gran ciclo sedimentario limitado por importantes discontinuidades y al que se ha denominado Supersecuencia del Cretácico Inferior o Megasecuencia Cretácica Inferior (Salas, 1987, Salas *et al.*, 1991). Las diferentes unidades estratigráficas usadas en este trabajo son básicamente las definidas por estos autores.

Por encima de la discontinuidad de la secuencia del tránsito Jurásico-Cretácico se sitúa la Formación Castellar, que constituye por sí misma una megasecuencia de depósito. Esta unidad está caracterizada por arcillas rojas con intercalaciones arenosas, típicas de extensas llanuras lutíticas surcadas esporádicamente por canales, mientras que a techo se produce la instalación de un sistema lacustre de muy baja energía, caracterizado por margas y calizas bioturbadas. La



potencia de este sistema lacustre no excede en ningún caso los 20 metros. En función de la flora de carofitas reconocida en los sedimentos lacustres de esta unidad fuera del area de Galve, se le puede atribuir a esta formación una edad Hauteriviense terminal-Barremiense basal.

Las facies lacustres del techo de la Formación Castellar fueron objeto de un detallado estudio por Diaz Molina y Yebenes (1987) siendo este intervalo estratigráfico donde mayor concentración de yacimientos de microvertebrados se han encontrado ("nivel de Colladico Blanco"). Los estudios que se están haciendo en la actualidad en estos materiales, muestran la presencia, en las facies margosas, de orbitolinas, ostreidos y gasterópodos típicos de medios

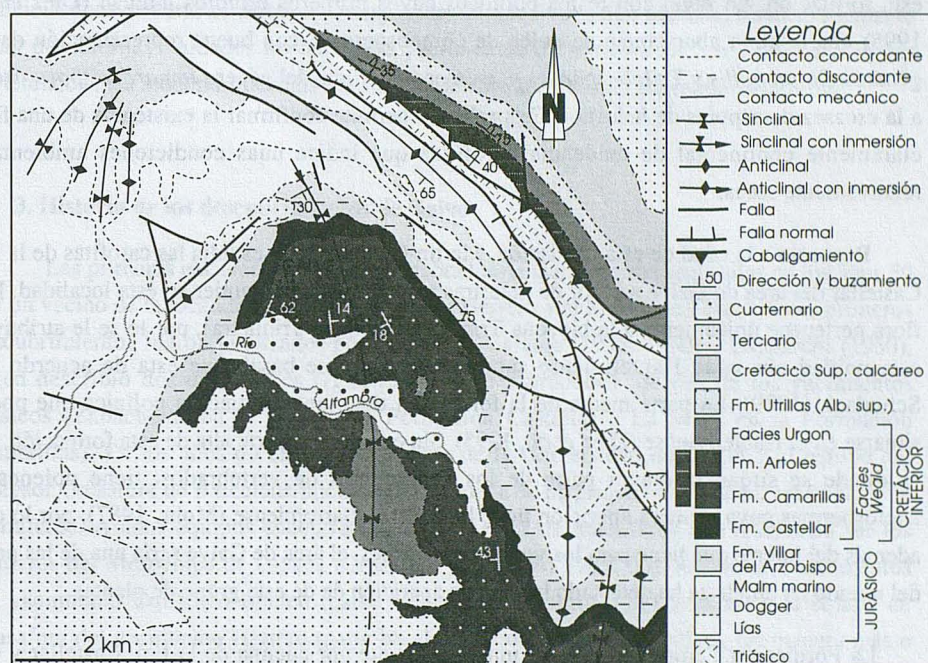


Fig. 2: Cartografía geológica del sinclinal de Galve. Modificada de Diaz-Molina y Yebenes (1987)

transicionales, que si bien no son extremadamente abundantes, muestran una presencia muy constante en los yacimientos estudiados.

Estas facies se interpretan como sedimentos de agua posiblemente salobre, depositados en lagunas efímeras con aportes ocasionales de material terrígeno. Diaz-Molina y Yebenes (1987) establecen que los tramos margosos ricos en nódulos se formarían en las zonas periféricas de estas lagunas y/o en las fases de desecación de las mismas, en condiciones palustres. Estas facies calcáreas están constituidas o bien por *mudstone-wackestone* masivos con carofitas, gasterópodos y bivalvos o bien por *mudstone* arcillosos con gasterópodos, bivalvos y



estructuras prismáticas de desecación (Díaz-Molina y Yebenes, 1987). No obstante algunas de estas estructuras no parecen consecuencia, únicamente de procesos de desecación, de hecho hay madrigueras producidas por invertebrados (posiblemente crustáceos).

En función de estas características Díaz-Molina y Yebenes (1987) interpretan para el conjunto de esta unidad lagunas efímeras de aguas dulces o salobres, situadas probablemente en zonas no muy alejadas de la línea de costa. Las características sedimentológicas que presenta esta unidad en el área de Galve son propias de extensas áreas lacustres de subambientes supralitorales (palustres) y eulitorales. Recientemente se ha encontrado en la parte media de esta formación, un nivel con restos polínicos cuyos primeros estudios indican (Diez *et al.*, 1995) una relativa abundancia de polen de Gimnospermas, con buena representación de los géneros *Classopollis* y *Trilobosporites* y, en menor medida, del género *Impardecispora*, frente a la escasez de esporas de helechos. Esta relación permite confirmar la existencia de una flora claramente continental de tendencia xerofítica que indica unas condiciones ambientales relativamente secas.

Respecto a la edad de esta formación, Martín-Closas (1989) estudia las carofitas de la Fm. Castellar del área de Galve a partir de muestras recogidas por F. Gautier en esta localidad. Esta flora pertenece únicamente a la biozona Triquetra (subzona Triquetra), por lo se le atribuye a esta unidad una edad Hauteriviense superior-Barremiense basal, que esta de acuerdo con Schudack (1989). La parte media de la formación tiene una asociación polínica que podría situarse en el Hauteriviense (Diez *et al.*, 1995). Sin embargo la parte alta de esta formación, que es donde se sitúan la mayor parte de los yacimientos de vertebrados, tiene polenes de angiospermas cuya primera aparición tiene lugar en el Barremiense (Mohr, 1987), por lo qué, además del interés que tiene para los vertebrados fósiles, el área de Galve sería una de las pocas del mundo en donde se ha detectado la primera aparición de este grupo de plantas.

La Formación Camarillas se sitúa inmediatamente por encima de la Fm. Castellar y está formada por arcillas rojas y areniscas blancas de medios fluviales (Fig. 2). En la Fm. Camarillas se han encontrado carofitas típicas de la biozona *Triquetra-Neimongolensis* (subzona de *Calcitrapus*), atribuida al Barremiense inferior (Martín-Closas, 1989). El límite inferior de esta formación coincide con el superior de la secuencia de depósito de Castellar. No obstante en los sectores marginales de la cuenca de Aliaga, donde no está representada Castellar, este límite corresponde a una discontinuidad manifestada como una discordancia cartográfica que en ocasiones lleva asociada discordancias internas progresivas. Esta formación está ampliamente representada, mostrando un carácter claramente expansivo con respecto a la Formación Castellar. El límite superior es otra discontinuidad que se manifiesta por una paraconformidad y lleva asociada un cambio sedimentológico neto (aunque en algunos puntos de la cuenca es bastante gradual), produciéndose a partir de este momento las primeras incursiones marinas significativas dentro de la cuenca (Fm. Artoles).



La Formación Artoles está constituida por arcillas verdes, calizas con ostreidos y areniscas que marcan la instalación de un medio marino somero restringido tipo *lagoon*. En la Cubeta de Aliaga, esta formación tiene una edad Barremiense superior-Aptiense basal ya que presenta un foraminífero aglutinado típico (*Paleorbitolina lenticularis lenticularis*). En la base de esta formación, las intercalaciones continentales muestran una flora de carofitas correspondientes a la biozona *Cruciata-Pancibractratus* (Martín-Closas, 1989). El límite superior es un discontinuidad que se manifiesta como una paraconformidad, a partir de la cual se produce la instalación definitiva de la primera plataforma carbonatada de edad Aptiense representada por la Formación Chert. Sin embargo en Galve, este límite lleva asociado la entrada de terrígenos sicliclásticos de carácter deltáico correspondientes a la Formación Morella. Hasta el momento estas dos últimas unidades no han dado yacimientos de vertebrados, en consecuencia los vertebrados más modernos de Galve hasta el momento son de edad Barremiense inferior.

### 3. Historia de los descubrimientos de Galve

Las primeras excavaciones de los vertebrados de Galve fueron realizadas en los años 50 por un vecino de la localidad llamado José María Herrero y el Museo de Teruel. Estos primeros descubrimientos fueron publicados por Fernández-Galiano (1958, 1960) y Lapparent (1960), quién describió dos dinosaurios (*Iguanodon* y un saurópodo) de dos de los yacimientos clásicos (Zabacheras en la base de la Formación Castellar y La Maca en la Formación Camarillas). En los años 60 el profesor Kühne de la Universidad de Berlín y el equipo del profesor Crusafont de Barcelona iniciaron la búsqueda de pequeños vertebrados, especialmente mamíferos. Ambos equipos encontraron diversos tipos de mamíferos que resultaron ser los primeros del Mesozoico de España (Crusafont y Adrover, 1965, 66). Kühne lavó sedimentos del yacimiento Colladico Blanco (parte superior de la Formación Castellar) y el equipo de Crusafont del yacimiento Herrero (parte basal de la Formación Camarillas). De manera más o menos continúa el equipo de Berlín ha seguido trabajando en los últimos años; su objeto de estudio han sido los mamíferos, pequeños reptiles escamosos, cocodrilos, huevos de reptiles, invertebrados, polen y carofitas. En los años 80 comienzan las investigaciones de los equipos de la Universidad Autónoma de Madrid y el Instituto de Paleontología de Sabadell (Sanz, 1984; Sanz *et al.*, 1984), los cuales estudiaron los restos de dinosaurios y cocodrilos que se conocían hasta ese momento, determinando 35 taxones de vertebrados (Buscalioni y Sanz, 1987b). También se estudiaron las primeras huellas de dinosaurios conocidas hasta ese momento en esta parte de la Cordillera Ibérica (Casanovas *et al.*, 1983-84).

En el año 1991, se inicia una nueva etapa ya que un equipo de la Universidad de Zaragoza retoma el estudio paleontológico de las faunas de vertebrados de Galve. En primer lugar se han catalogado todos los yacimientos conocidos, situandolos en la serie estratigráfica local (Cuenca-Bescós *et al.*, 1994). Este es un punto importante, ya que en la literatura solía



citarse Galve como un único yacimiento y con una edad imprecisa. Con nuestro trabajo se ha podido situar en su edad todos los yacimientos y situarlos en un contexto estratigráfico regional. Hasta el momento hay inventariados 65, de los cuales el material paleontológico publicado en parte o completo es de 25 yacimientos, distribuidos en 18 niveles. Este inventario está permitiendo hacer una evaluación de la vulnerabilidad de estos yacimientos para planificar las acciones a realizar en los próximos años. Hay diversos factores que determinan las acciones futuras: disponibilidad de investigadores, peligro de destrucción, acciones de urgencia, posibilidades de financiación, etc. En esta primera etapa se ha dado prioridad, por una parte, al estudio de los dinosaurios ornitópodos y por otra, al de los microvertebrados, especialmente mamíferos y pequeños dinosaurios, para lo cual se han lavado hasta el momento varias toneladas de diferentes yacimientos, habiendo obtenido abundantes restos que están siendo estudiados en la actualidad.

#### **4. Los yacimientos de vertebrados**

Los yacimientos de vertebrados de Galve se pueden dividir en tres tipos de acumulaciones. La más sencilla, son los yacimientos con la presencia de un solo resto, generalmente un dinosaurio y posiblemente en relativa conexión anatómica. Este sería el caso en el que hay un gran número de elementos de un solo dinosaurio (P.e. Las Zabacheras, La Maca, Cuesta Lonsal, etc.) y prácticamente no hay nada más. En estos yacimientos no podemos conocer si había conexión anatómica ya que fueron excavados en los años sesenta y no se dispone de información tafonómica de los restos.

La mayor parte de los yacimientos son una acumulación más o menos grande de restos de microvertebrados, con algunos elementos aislados de macro, como puede ser un centro vertebral o un diente. Con esta situación hay de dos tipos, el primero tienen una gran continuidad lateral y una relativa escasa concentración. Por ejemplo el nivel "Colladico Blanco", situado en el techo de la formación Castellar, es una marga gris de pocos centímetros de espesor que puede ser seguida varios kilómetros en el sinclinal de Galve. En todos los puntos donde el afloramiento es bueno hay una acumulación de microvertebrados, y dispersamente algún resto de de mayor tamaño. Este nivel se ha denominado de diferente manera en la literatura (Colladico Blanco, Cuesta de los Corrales, P1, etc.). Este yacimiento podría estar en relación con un ambiente palustre en conexión con el mar, donde no habría corrientes que acumularan selectivamente los restos. En estos niveles no es raro encontrar paladares de peces u otros elementos anatómicos completos.

Un tipo diferente son los yacimientos de la Formación Camarillas, los cuales tienen poca continuidad lateral. En este caso, es más corriente encontrar restos de mayor tamaño que en los anteriores. La microfauna es mucho más abundante, pero su conservación es peor, ya que



los dientes suelen tener abrasión y corrosión. Sin embargo, de manera aleatoria en alguno de estos yacimientos se han encontrado los mejores fósiles como puede ser un cráneo de *Bernissartia* en el nivel Cerrada - Roya Mina (Buscalioni *et al.*, 1984) etc. Aunque no conocemos bien un modelo que se pueda aplicar para explicar de manera satisfactoria la formación de estos yacimientos, una aproximación podría ser la de canales intermareales que aportaron elementos del continente y en momentos de subida de la marea la corriente marina depositaría los fragmentos de vertebrados e invertebrados marinos.

Por último en el área de Galve son abundantes los elementos aislados de vertebrados que no llegan a formar verdaderos yacimientos. Son más frecuentes los restos de grandes vertebrados, en su mayoría dinosaurios. Estos descubrimientos aislados corresponde a piezas óseas en diferentes estados de conservación. Estos restos han aparecido en todas las formaciones, habiendo algunos grupos como son los dinosaurios acorazados que hasta el momento, únicamente se conocen por estos descubrimientos aislados.

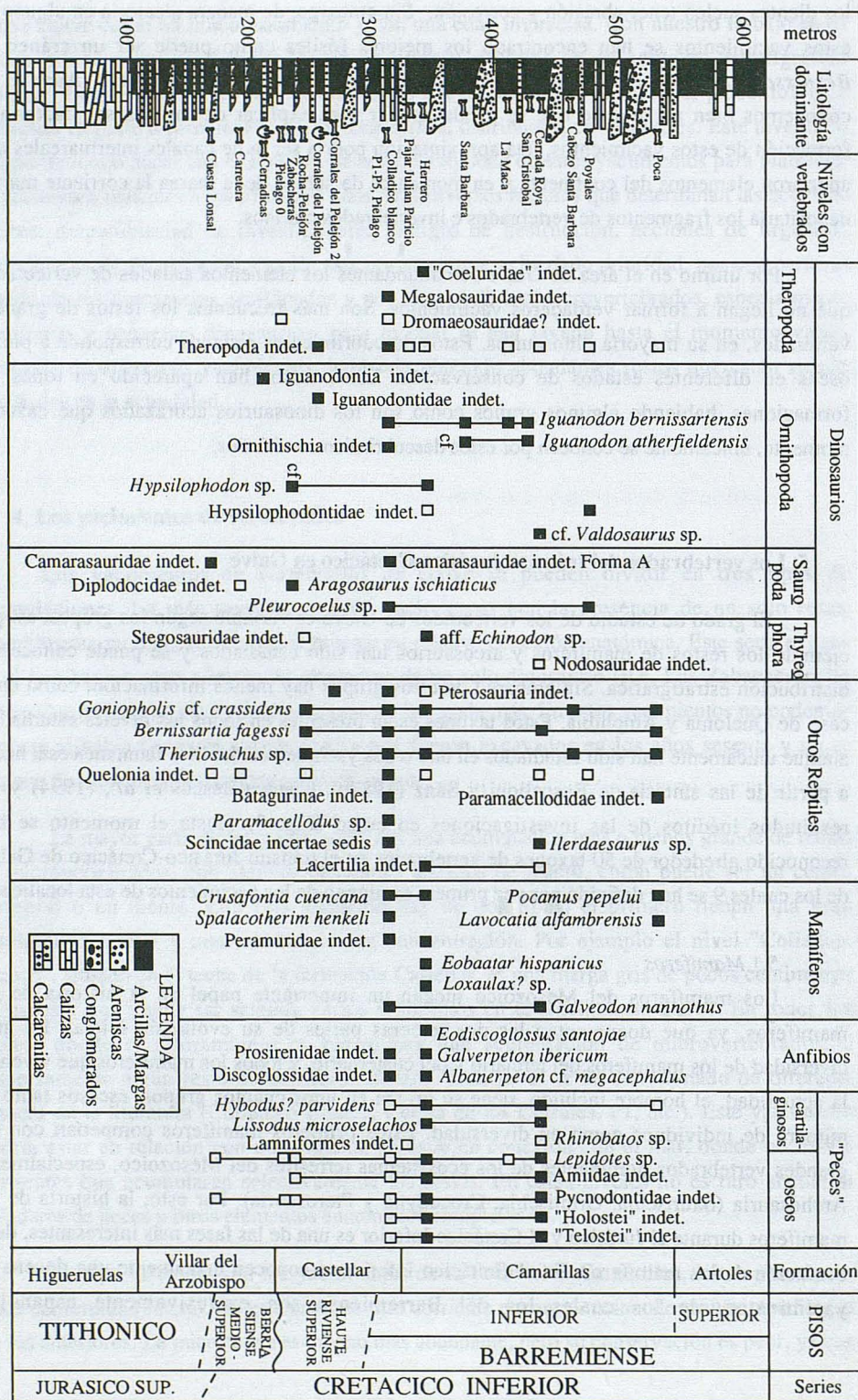
## 5. Los vertebrados del tránsito Jurásico-Cretácico en Galve

El grado de estudio de los vertebrados de Galve es variable según los grupos, así por ejemplo los restos de mamíferos y arcosaurios han sido estudiados y se puede conocer su distribución estratigráfica. Sin embargo de otros grupos hay menos información, como en el caso de Quelonia y Amphibia. Estos taxones están presentes en todos los niveles estudiados, aunque únicamente han sido estudiados en uno o dos yacimientos. La lista faunística esta hecha a partir de las síntesis de Buscalioni y Sanz (1987b), Cuenca-Bescós *et al.*, (1994) y los resultados inéditos de las investigaciones en curso (Fig. 3). Hasta el momento se han reconocido alrededor de 50 taxones de vertebrados en el tránsito Jurásico-Cretácico de Galve, de los cuales 9 se han definido por vez primera en alguno de los yacimientos de esta localidad.

### 5.1 Mamíferos

Los mamíferos del Mesozoico juegan un importante papel en la historia de los mamíferos, ya que documentan las dos terceras partes de su evolución inicial. La gran diversidad de los mamíferos del terciario y del cuaternario, y todos los mamíferos que viven en la actualidad, el hombre incluido, tiene su origen en unos cuantos grupos, escasos tanto en número de individuos como en diversidad. Estos primeros mamíferos competían con los grandes vertebrados dominantes de los ecosistemas terrestres del Mesozoico, especialmente Archosauria (Saurischia, Ornithischia, Crocodylia y Pterosauria). Por esto, la historia de los mamíferos durante el Jurásico y el Cretácico Inferior es una de las fases más interesantes, de la evolución de los mamíferos. En el Cretácico Inferior se conocen únicamente una docena de yacimientos, de los cuales los del Barremiense son exclusivamente españoles.







Hay dos localidades clásicas: Galve en Teruel y Uña en Cuenca, y una tercera descubierta recientemente, Vallipón también en Teruel (Cuenca-Bescós *et al.*, 1995).

En Galve se encontro el primer mamífero español del Mesozoico (Crusafont y Adrover, 1965, 66). Posteriormente los descubrimientos han sido abundantes, habiendose reconocido nueve especies, seis de las cuales (*Spalacotherium henkeli*, *Eobaatar hispanicus*, *Parendotherium herreroi*, *Lavocatia alfambrensis*, *Pocamus pepelui* y *Galveodon nannothus*) están descritas y son exclusivas de Galve y otra (*Crusafontia cuencana*) ha sido encontrada en otras localidades españolas (Kühne, 1966; Crusafont y Gibert, 1967; Krebs, 1980, 1985, 1993; Hahn y Hahn, 1992; Cuenca-Bescós *et al.*, 1995; Canudo y Cuenca-Bescós, 1996). Estos taxones están descritos a partir de dientes sueltos, no habiendose encontrado mandíbulas ni maxilares. También hay restos postcraneales pero por el momento no se han descrito.

La abundancia de taxones demuestra que los mamíferos de esta edad estaban bien diversificados y eran relativamente abundantes. Su escasez en los yacimientos está determinada por procesos tafonómicos: la mayoría de los restos se encuentran en ambientes poco favorables para la acumulación de vertebrados, suelen ser medios de transición o extensas llanuras de inundación en dónde la concentración es prácticamente nula. Lo más destacable de los mamíferos de Galve es que son exclusivos en el mundo, lo que podría indicar un endemismo de estas faunas o simplemente que nuestro conocimiento de los mamíferos de esta edad es muy escaso.

Los multituberculados son el grupo de mamíferos más común tanto en por su diversidad como por su abundancia en los yacimientos. Sólo se conocen de momento representantes del suborden Plagiaulacoidea. Hay representantes de los Paulchoffatiidae (*Galveodon*, *Lavocatia*), familia que se origina y desarrolla en el Jurásico de Portugal y que se conoce hasta el Cretácico Inferior de Europa y el Norte de Africa. Hay también especies pertenecientes a la subfamilia Eobaatarinae (formas afines a *Eobaatar* y *Loxaulax*), familia que se conoce exclusivamente en el Cretácico Inferior de Europa y Asia. La especie *Parendotherium herreroi* es una forma de afinidades inciertas que estamos estudiando y revisando en la actualidad, pero probablemente, debido a la pérdida del holotipo, sea considerada como *nomen nudum* en un artículo en preparación.

Los drioléstidos de Galve como *C. cuencana* constituyen el último registro conocido de estos terios no tribosfénicos en Europa (están representados en el Jurásico Medio y Superior de Europa), aunque este grupo continúa su historia en el Cretácico Inferior de Asia y en el Cretácico Superior de Suramérica. Los peramúridos son exclusivos del Jurásico superior inglés y en el Aptiense-Albiense de Mongolia, por lo que el material español no solo amplía el área de distribución de este grupo sino que nos permite conocer algo más de este grupo, posiblemente el tronco ancestral del que derivan los metaterios (marsupiales) y euterios (placentados). Los simmetrodontos son un grupo numeroso en el Jurásico Superior también se encuentran en el Cretácico Superior de Norteamérica. En el Cretácico Inferior, *Spalacotherium*, posiblemente



una nueva especie de *Vallipón* (España, Inglaterra) y *Manchurodon* de China son los únicos representantes (Krebs, 1985).

## 5.2 Dinosaurios

Los dinosaurios son relativamente abundantes, aunque sus restos son fragmentarios y aislados. Se han reconocido tanto a partir de restos directos (huesos) como indirectos (icnitas y fragmentos de cáscaras de huevo). Han aparecido restos de cuatro de los cinco subordenes conocidos de dinosaurios: Sauropoda, Theropoda, Ornithopoda y Thyreophora (Lapparent, 1960; Sanz *et al.*, 1984a y b, 1987, 1990; Ruiz-Omeñaca y Cuenca-Bescós, 1995).

La gran mayoría de los saurópodos se han encontrado en las Formaciones Villar del Arzobispo y Castellar, y hasta el momento hay un único resto en la Formación Camarillas. Hay seis taxones, dos de los cuales son exclusivos de Galve. La especie *Aragosaurus ischiaticus* es un camarasaurido descrito por Sanz *et al.* (1987), del que se conoce un diente (Sanz, 1982) y parte del esqueleto postraneal. Parte de los restos de este dinosaurio se encuentran en la sala de exposiciones de Galve y pertenecen al Museo de Teruel. En el Titónico se encuentran los restos de otro camarasaurido sin describir (Perez Oñate *et al.*, 1994) que no está totalmente excavado. Recientemente se ha encontrado un diente de diplodócido, también en el Jurásico, que junto a otros tres sauropodos descritos en el nivel de Colladico Blanco (Camarasauridae indet. Forma A, Camarasauridae indet. Forma B, cf. *Pleurocoelus* = *Astrodon* sp.) forman la representación de este grupo (Sanz *et al.*, 1987). Aunque no se han encontrado huellas atribuibles a saurópodos, algunas estructuras circulares de los yacimientos de las Cerradicas y los Corrales del Pelejón podrían representar subpistas de huellas de estos dinosaurios (Cuenca *et al.*, 1993).

Los restos de terópodos se han encontrado prácticamente en todos los yacimientos, especialmente dientes en las formaciones Castellar y Camarillas, a pesar de lo cual han sido poco estudiados. Se han encontrado dientes, falanges ungueales y vértebras de gran tamaño (Theropoda indet., Carnosauria indet.) y de pequeño tamaño (?Coeluridae indet.), además de huellas de diferentes tamaños (Casanovas *et al.*, 1983-84; Cuenca *et al.*, 1993; Perez-Lorente *et al.*, 1996). En las excavaciones recientes se han encontrado nuevos restos, algunos posiblemente de dromeosauridos. En los años 60, José María Herrero encontró un diente de un terópodo de gran tamaño, que fue determinado por Crusafont y Adrover (1966) como una forma similar a *Carcharodontosaurus*. Por el momento no se ha incluido en la lista faunística, ya que no se conoce exactamente en que nivel estratigráfico fue encontrado, podría ser de un nivel equivalente a Colladico Blanco.

Los ornitópodos son los dinosaurios más abundantes de la formación Camarillas. Los ornitópodos pequeños están representados por las familias Hypsilofontidae y Dryosauridae. Han aparecido por el momento dientes aislados y restos postcraneales de hipsilofodóntidos en varios yacimientos (Fig. 3). Donde están mejor representados es en el yacimiento de Poyales, donde se encontraron más de cien restos de un hipsilofodóntido, posiblemente nuevo, que



actualmente se encuentra en estudio (Ruiz-Omeñaca y Cuenca-Bescós, 1995). En Galve es el único lugar de España donde están representados los driosauridos (un femur de cf. *Valdosaurus* sp., Sanz *et al.*, 1987).

De entre los ornitópodos de tamaño grande se han encontrado representantes de la familia Iguanodontidae. De este grupo se han encontrados numerosos restos postcraneales (fundamentalmente vertebras) y dentarios de *Iguanodon bernissartensis* e *I. atherfieldensis*.

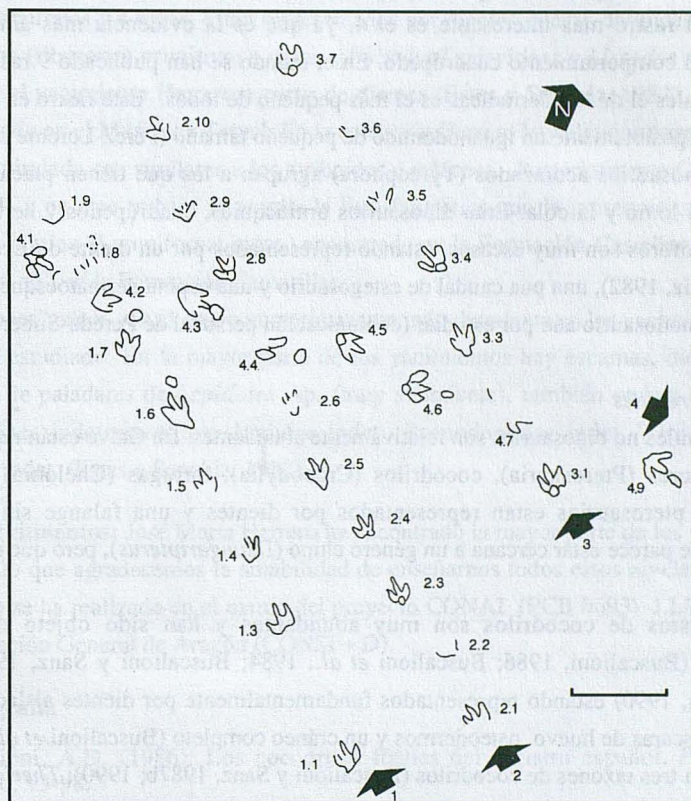


Fig. 4: Esquema de las icnitas de las Cerradicas. Modificado de Perez-Lorente *et al.*, 1996.

En la formación Camarillas se encuentran algunos de los yacimientos clásicos de este grupo (Sanz *et al.*, 1984a, b), sin embargo en la formación Castellar únicamente se han reconocido por restos indirectos (Corrales del Peleón, Cuenca *et al.*, 1993).

En niveles estratigráficos más bajos (posiblemente Berriasiense) hay evidencias icnológicas de ornitópodos cuadrúpedos de pequeño tamaño (Yacimiento de Las Cerradicas, Fig. 4). La importancia de estos restos es que constituyen el rastro cuadrúpedo de iguanodóntido más antiguo y más pequeño que se ha encontrado en el mundo (Perez-Lorente *et al.*, 1996).



En las Cerradicas se puede observar un conjunto de cuatro rastros, tres de ellos subparellos y otro que los corta (en total 40 pisadas). Estas huellas se produjeron en un medio marino intermareal, que en el momento de producirse no debía estar empapado de agua, ya que la conservación es excelente. Las rizaduras de corriente (producidas por una lámina de agua) debieron producirse con anterioridad a las huellas. Los rastros 1, 2 y 3 (fig. 4) son huellas típicamente tridactilas, producidas por un pequeño dinosaurio, que podría ser un terópodo o un ornitópodo. El rastro más interesante es el 4, ya que es la evidencia más antigua de un ornitópodo con comportamiento cuadrúpedo. En el mundo se han publicado 9 rastros de este tipo, de los cuales el de las Cerradicas es el más pequeño de todos. Este rastro es típicamente de ornitópodo, posiblemente un iguanodontido de pequeño tamaño (Perez-Lorente *et al.*, 1996).

Los dinosaurios acorazados (Tyreophora) agrupan a los que tienen placas y espinas dérmicas en el lomo y la cola. Eran dinosaurios ornitisquios, cuadrúpedos y herbívoros. En Galve, los tireóforos son muy escasos, estando representados por un diente de *Echinodon* sp. (Estes y Sanchiz, 1982), una púa caudal de estegosaurio y una espina dermatoesquelética de un anquilosaurio-nodosaurio aún por estudiar (comunicación personal de Pereda-Suberbiola).

### 5.3 Otros reptiles

Los reptiles no dinosaurios son relativamente abundantes. En Galve están representados reptiles voladores (Pterosauria), cocodrilos (Crocodylia), tortugas (Chelonia) y lagartos (Sauria). Los pterosaurios están representados por dientes y una falange sin atribución sistemática, que parece estar cercana a un género chino (*Dsungaripterus*), pero que es de mayor tamaño.

Los restos de cocodrilos son muy abundantes y han sido objeto de diversas publicaciones (Buscalioni, 1986; Buscalioni *et al.*, 1984; Buscalioni y Sanz, 1984, 1987a, 1990; Kohring, 1990) estando representados fundamentalmente por dientes aislados, centros vertebrales, cáscaras de huevo, osteodermos y un cráneo completo (Buscalioni *et al.*, 1984). Se han reconocido tres taxones de cocodrilos (Buscalioni y Sanz, 1987b; 1990): *Theriosuchus* sp., *Bernissartia fagesii* y *Goniopholis cf. crassidens*.

Los restos de Sauria son escasos, habiéndose reconocido fragmentos de mandíbulas y placas dérmicas, se han identificado cinco taxones: *Ilerdaesaurus* sp., *Lacertilia* indet., *Paramacellodidae* indet., *Paramacellodus* sp. y *Scincidae* incertae sedis (Estes y Sanchiz, 1982; Richter, 1994a y b). A partir de fragmentos de huevos se han reconocido tres tipos diferentes de tortugas, una de las cuales podría ser Batagurinae indet. (Kohring, 1990). Los restos óseos de tortugas, algunos muy completos permanecen sin estudiar.

### 5.4 Anfibios

Los anfibios son escasos, estando representados por fragmentos de esqueleto postcraneal, maxilares y mandíbulas. Se han reconocido tres especies de anfibios en el Barremiense inferior de Galve: *Albanerpeton cf. megacephalus*, *Eodiscoglossus santोजae* y



*Galverpeton ibericum*, de las cuales la tercera es una salamandra definida en Galve (Estes y Sanchiz, 1982), a partir de una vertebra aislada de la colección del Museo de Sabadell.

### "5.5 Peces"

Los pisciformes se han reconocido en todos los yacimientos con microfauna, aunque solo han sido estudiados con detalle en tres. Los Chondrichthyes (peces cartilagosos), que incluyen a tiburones y a rayas, estan representados por dientes, placas dérmicas, y espinas de hibodóntidos (tiburones primitivos), como *Hybodus? parvidens* y *Lissodus microselachos* definido en el yacimiento Herrero a partir de dientes (Estes y Sanchiz, 1982). Este holotipo esta depositado en el Museo de Teruel. En la colección Herrero hay algunos coprolitos que por su forma espiralada son similares a los atribuidos a seláceos. Posteriormente Cuenca-Bescós *et al.* (1994) y en este trabajo se amplia la lista faunística con la presencia de otro tiburón tipicamente marino (Lamniforme indet.) encontrado en la Formación Castellar y de una raya (*Rhinobatos* sp.) en la Formación Camarillas.

Los "peces" oseos son el grupo numericamente más abundante en los yacimientos de Galve y el menos estudiado. En la mayor parte de los yacimientos hay escamas, dientes sueltos y fragmentos de paladares de *Lepidotes* sp. (muy abundante), también se han descrito otros cuatro taxones indeterminados: Amiidae indet., Pycnodontidae indet. "Holostei" indet. y "Teleostei" indet. (Estes y Sanchiz, 1982).

**Agradecimientos:** José María Herrero ha encontrado la mayor parte de los yacimientos de Galve, por lo que agradecemos la amabilidad de enseñarnos todos estos niveles en el campo. Este trabajo se ha realizado en el marco del proyecto CONAI (PCB 0693). J.I.R.O. es becario de la Diputación General de Aragón (CONSI + D).

### Bibliografía

- Buscalioni, A.D. (1986): Los cocodrilos fósiles del registro español. *Paleontología i Evolució*, 20: 93-98.
- Buscalioni, A.D., Buffetaut, E. y Sanz, J.L. (1984): An immature specimen of the crocodilian *Bernissartia* from the Lower Cretaceous of Galve (province of Teruel, Spain). *Paleontology*, 27(4): 809-813.
- Buscalioni, A.D. y Sanz, J.L. (1984): Los Arcosaurios (Reptilia) del Jurásico superior-Cretácico inferior de Galve (Teruel, España). *Teruel*, 71: 9-28.
- Buscalioni, A.D. y Sanz, J.L. (1987a): Cocodrilos del Cretácico inferior de Galve (Teruel, España). In: Geología y Paleontología (Arcosaurios) de los yacimientos de Galve (Teruel, Cretácico inferior) y Tremp (Lérida, Cretácico superior). *Estudios Geológicos* vol. extr. Galve-Tremp: 23-43.
- Buscalioni, A.D. y Sanz, J.L. (1987b): Lista faunística de los vertebrados del Cretácico inferior del área de Galve *Estudios Geológicos* vol. extr. Galve-Tremp: 65-67.



Buscalioni, A.D. y Sanz, J.L. (1990): The small crocodile *Bernissartia fagesii* from the Lower Cretaceous of Galve (Teruel, Spain). *Bulletin de L'Institut Royal des Sciences Naturelles de Belgique, Sciences de la Terre*, 60: 129-150.

Canudo, J.I. y Cuenca-Bescós, J.I. (1996): Two new mammalian teeth (Multituberculata and Peramuria) from the Lower Cretaceous (Barremian) of Spain. *Cretaceous Research*, 17: 1-18.

Canudo, J.I., Cuenca-Bescós, J.I., Ruiz-Omeñaca, J.I. y Soria, A.R. (1996): Los yacimientos de vertebrados en el tránsito Jurásico-Cretácico de Galve (Teruel). *II Reunión de Tafonomía y Fossilización*, Guía de la Excursión: 1-19.

Casanovas, M.L., Santafé, J.V. y Sanz, J.L. (1983-84): Las icnitas de "Los Corrales del Pelejón" en el Cretácico inferior de Galve (Teruel, España). *Paleontología i Evolució*, 18: 173-176.

Crusafont, M. y Adrover, R. (1965): El primer mamífero del Mesozoico español. *Fossilia*, 5-6: 28-33.

Crusafont, M. y Adrover, R. (1966): El primer representante de la clase mamíferos hallado en el Mesozoico de España. *Teruel*, 35: 139-143.

Crusafont, M. y Gibert, J. (1976): Los primeros multituberculados de España. Nota preliminar. *Acta Geológica Hispánica*, 11(3): 57-64.

Cuenca, G., Ezquerro, R., Pérez, F., Soria, A.R. (1993): Las huellas de dinosaurios (Icnitas) de los corrales del Pelejón. Gobierno de Aragón. 14pp.

Cuenca-Bescos, G., Amo, O., Aurell, M., Buscalioni, A.D., Canudo, J.I., Laplana, C., Perez Oñate, J., Ruiz Omeñaca, J.I., Sanz, J.I. y Soria, A.R. (1994): Los vertebrados del tránsito Jurásico-Cretácico de Galve (Teruel). *Comunicaciones de las X Jornadas de Paleontología*: Madrid: 50-53.

Cuenca-Bescos, G., Canudo, J.I., Díez-Ferrer, B., Ruiz-Omeñaca, J.I. y Soria, A.R. (1995): Los mamíferos del Barremiense (Cretácico inferior) de España. *XI Jornadas de Paleontología*, Tremp: 65-68.

Díaz-Molina, M., Yébenes, A., Goy, A. y Sanz, J.L. (1984): Landscapes inhabited by Upper Jurassic/Lower Cretaceous archosaurs (Galve, Teruel, Spain). *Third Symposium on Mesozoic Terrestrial Ecosystems*, Tübingen. 208-215

Díaz-Molina, M. y Yébenes, A. (1987): La sedimentación litoral y continental durante el Cretácico inferior. Sinclinal de Galve, Teruel. *Estudios Geológicos*, vol. extr. Galve-Tremp: 3-21.

Díaz-Molina, M., Yébenes, A., Goy, A. y Sanz, J.L. (1985): Le Jurassique Supérieur detritique-carbonaté du synclinal de Galve (Teruel). *Strata*, Série 2, 2: 155-182.

Diez, J.B., Pons, D., Canudo, J.I., Cuenca, G. y Ferrer, J. (1995): Primeros datos palinológicos del Cretácico inferior continental de Pielago, (Galve, Teruel). *XI Jornadas de Paleontología*: 79-81.

Estes, R. y Sanchiz, B. (1982): Early Cretaceous Lower Vertebrates from Galve (Teruel). *Journal of Vertebrate Paleontology*, 20: 1-13.

Fernández-Galiano, D. (1958): Descubrimiento de restos de Dinosaurios en Galve. *Teruel*, 20: 1-3.



- Fernández-Galiano, D. (1960): Yacimientos de Dinosaurios en Galve (Teruel). *Boletín de la Real Sociedad Española Historia Natural* (Geología) LVIII: 95-96.
- Hahn G. y Hahn, R. (1992): Neue Multituberculaten-Zähne aus der Unter-Kreide (Barremium) von Spanien (Galve und Uña). *Geologica et Palaeontologica*, 26: 143-162.
- Kohring, R. (1990): Fossile Reptil-Eischalen (Chelonia, Crocodilia, Dinosauria) aus dem unteren Barremium von Galve (Provinz Teruel, SE-Spanien). *Paläontologische Zeitschrift* 64 (3/4): 329-344.
- Krebs, B. (1980): The search for Mesozoic Mammals in Spain and Portugal. *Mesozoic Vertebrate Life*, 1: 23-25
- Krebs, B. (1985): Theria (Mammalia) aus der Unterkreide von Galve (Provinz Teruel, Spanien). *Berliner Geowissenschaftliche Abhandlungen* (A), 60: 29-48.
- Krebs, B. (1993): Das Gebiß von *Crusafontia* (Eupantotheria, Mammalia) - Funde aus der Unter-Kreide von Galve und Uña (Spanien). *Berliner Geowissenschaftliche Abhandlungen* (E), 9: 233-252.
- Kühne, W. (1966): Decouverte de dents de mammiferes dans le Wealdien de Galve (province de Teruel, Espagne). *Teruel*, 35: 159-161.
- Lapparent, A.F. de (1960): Los dos Dinosaurios de Galve. *Teruel*, 24: 177-197.
- Martín-Closas, C. (1989): *Els caròfits del Cretaci inferior de les conques perifèriques del Bloc de l'Ebre*. Tesis Doct. Dpto. de Geología Dinámica, Geofísica i Paleontología. Fac. de Geología. Univ. de Barcelona. Inédita., 581. Barcelona.
- Mohr, B.A.R. (1987): Mikroflora aus Vertebraten führenden Unterkreide - Schichten bei Galve und Uña (Ostspanien). *Berliner geowissenschaftliche Abhandlungen*, (A), 86: 69-85.
- Perez-Lorente, F., Cuenca-Bescós, G., Aurell, M., Canudo, J.I., Soria, A.R. y Ruiz-Omeñaca, J.I. (1996): Las Cerradicas Tracksite (Berriasian, Galve, Spain): Gowing Evidence for Quadrupedal Ornithopods. *Ichnos*, (en prensa)
- Perez Oñate, J., Cuenca Bescós, G. y Sanz, J.L. (1994): Un nuevo Saurópodo del Jurásico superior de Galve (Teruel). *Comunicaciones de las X Jornadas de Paleontología*: Madrid, 159-162.
- Richter, A. (1994a): Der problematische Lacertilier *Ilerdaesaurus* (Reptilia, Squamata) aus der Unter-Kreide von Uña und Galve (Spanien). *Berliner Geowissenschaftliche Abhandlungen*, (E) 13: 135-161.
- Richter, A. (1994b): Lacertilia aus der Unteren Kreide von Uña und Galve (Spanien) und Anoual (Marokko). *Berliner Geowissenschaftliche Abhandlungen* (E) 14: 1-147.
- Ruiz-Omeñaca, J. I. y Cuenca-Bescós, G. (1995): Un nuevo dinosaurio hipsilofodóntido (Ornithischia) del Barremiense Inferior de Galve (Teruel). *XI Jornadas de Paleontología*, Tremp: 153-156.
- Salas, R. (1987): *El Malm i el Cretaci inferior entre el Massís de Garraf i la Serra d'Espadà*. Tesis doctoral de la Universidad de Barcelona, 345 pp.
- Salas, R., Barrachicha, A., Cabanes, R. y Queol, X. (1991): Los sistemas deposicionales del Malm y Cretácico inferior de los Catalánides y de la Cordillera Ibérica Oriental. *XI Congreso Español de Sedimentología*. Libro guía de la excursión nº 4. 125 pp.



Sanz, J.L. (1982): A Sauropod Dinosaur tooth from the Lower Cretaceous of Galve (province of Teruel, Spain). *Geobios*, 15(6): 943-949.

Sanz, J.L. (1984): Las faunas españolas de dinosaurios. *I Congreso Español de Geología*, I: 497-506.

Sanz, J.L., Buscalioni, A.D., Casanovas, M.L. y Santafé, J.V. (1984): The archosaur fauna from the Upper Jurassic/Lower Cretaceous of Galve (Teruel, Spain). *Third Symposium on Mesozoic Terrestrial Ecosystems*. Tübingen: 201-207.

Sanz, J.L., Buscalioni, A.D., Casanovas, M.L. y Santafé, J.V. (1987): Dinosaurios del Cretácico inferior de Galve (Teruel, España). *Estudios Geológicos*, vol. extr: 45-64.

Sanz, J.L., Buscalioni, A.D., Moratalla, J.J., Francés, V. y Antón, M. (1990): Los reptiles mesozoicos del registro español. *Monografías del Museo Nacional de Ciencias Naturales*, 79 pp.

Sanz, J.L., Casanovas, M.L. y Santafé, J.V. (1984a): Iguanodóntidos (Reptilia, Ornithopoda) del yacimiento del Cretácico inferior de San Cristóbal (Galve, Teruel). *Acta Geológica Hispánica*, 19(3): 171-176.

Sanz, J.L., Casanovas, M.L. y Santafé, J.V. (1984b): Restos autopodiales de *Iguanodon* (Reptilia, Ornithopoda) del yacimiento de Santa Bárbara (Cretácico inferior) Galve, provincia de Teruel, España). *Estudios Geológicos*, 40: 251-257.

Schudack, M. (1989): Charophytenfloren aus den unterkretazischen Vertebraten-Fundschichten bei Galve und Uña Ostspanien. *Berliner geowissenschaftliche Abhandlungen*, A. 106: 409-443.

Soria, A.R. y Meléndez, A., Cuenca-Bescós, G., Canudo, J. I. y Liesa, C. L. (1995): Los sistemas lacustres del Cretácico inferior de la Cordillera Ibérica central: la cubeta de Aliaga. *Guía de excursiones-XIII Congreso español de Sedimentología*, Teruel: 91-141



**Nueva especie de *Neochordodes*  
(Gordiaceae Nematomorpha)  
parásita de *Scapteriscus* sp. (Grillotalpidae)**

D. B. de Miralles y L. C. de Villalobos

**Abstract**

A new specie of *Neochordodes* Carvalho (1942) (Gordiaceae Nematomorpha) parasite of *Scapteriscus* sp. Scudder (Grillotalpidae). A new specie of *Neochordodes* is described in this paper. It was found as a parasite of a female specimen of mole-cricket, wich was collected in Santa Elena, San Luis province, Argentine. Damage produced on the host is analyzed and the adult and juvenile stages of parasite are described in detail

**1. Introducción**

Al continuar nuestras investigaciones sobre los nematomorfos de la provincia de San Luis, realizamos durante el mes de octubre de 1985, un viaje de estudios en el que tuvimos la oportunidad de capturar un ejemplar hembra de grilloxopo (*Scapteriscus* sp.) del que emergió un gordiáceo. Esto nos permitió realizar una serie de observaciones con el propósito de determinar la relación existente entre ambos.

Los gordiáceos adultos habitan temporariamente las aguas dulces y se los halla en primavera y verano, aislados o en grupos formando ovillos y pueden deslizarse mediante ondulaciones o estar sujetos a plantas acuáticas y entre detritos vegetales. En esta etapa, su única función es la de reproducirse. El acoplamiento se realizar en el seno de voluminosos ovillos formado por individuos de ambos sexos; los huevos se depositan en el fondo, en forma de filamentos blanquecinos, de éstos nacen larvas que para proseguir su desarrollo deben hallar un hospedador al que ingresan atravesando la pared corporal mediante el aparato perforante larval y se instala en la cavidad general del hospedador. Luego cambia su forma, se alarga y se transforma en un verme blanco. Durante este período se alimenta del cuerpo graso del hospedador mientras comienza el desarrollo de sus órganos genitales; la cutícula que lo recubre se espesa y se oscurece, hasta que, progresivamente, alcanza el estado adulto. Frecuentemente las larvas penetran en estados inmaduros o adultos de insectos, moluscos, peces y batracios. En el interior de estos hospedadores ocasionales las larvas pueden continuar su desarrollo o enquistarse en los tejidos. Si el hospedador es devorado en estos momentos, por un organismo carnívoro las larvas pueden evolucionar normalmente sin sufrir alteraciones en este último.

En consecuencia, durante el desarrollo de los gordiáceos se pueden distinguir claramente tres estados: un primer estado larval, un segundo estado juvenil y un tercer estado adulto libre.

---

Facultad de Ciencias Naturales y Museo. Universidad Nacional de La Plata  
Paseo del Bosque s/n, 1900 La Plata, Argentina



## 2. Area de estudio

La prospección se realizó en las sierras de la provincia de San Luis y las cadenas limítrofes con Córdoba (Argentina) (Fig. 1). La gran antigüedad de estos bloques fracturados los conecta geológicamente con el escudo arcaico de Brasilia, formando un macizo de rocas metamórficas con abundancia de micas, gneiss e importantes masas de granito.

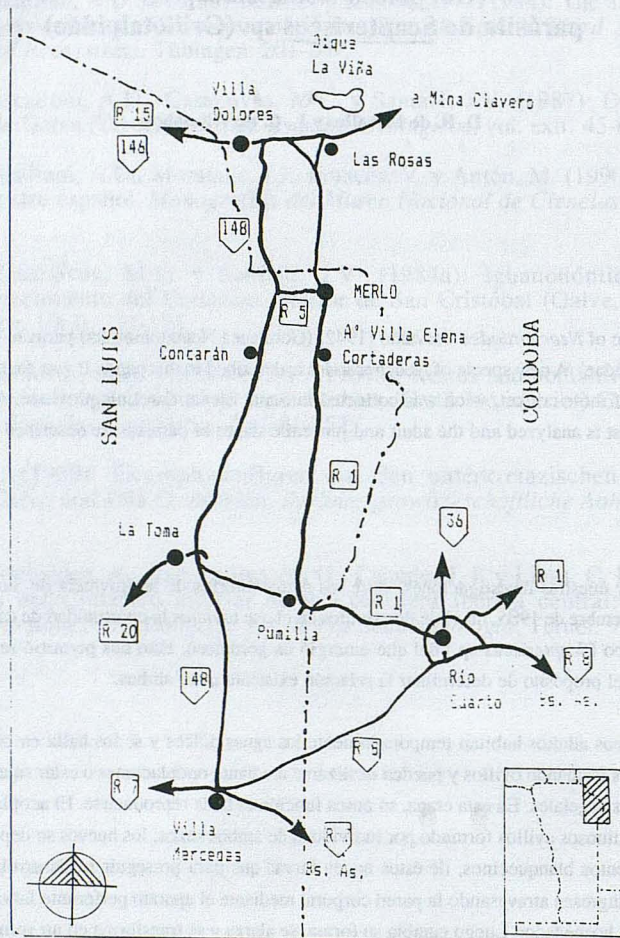


Figura 1. Mapa de la zona de colecta de *Neochordodes puntanus* n. sp.

La cuenca hidrográfica cuenta con numerosos riachos y arroyos de poco caudal que fluyen en distintas direcciones. En general son cuencas sin desagües que se agotan por evaporación o infiltración.

El clima es variado, predominando el tipo continental, con lluvias moderadas a escasas e inviernos suaves y veranos cálidos. La vegetación dominante es la de tipo xerófilo y junto a los ríos aparecen formaciones higrófilas.

Según Ringuelet (1961) esta zona corresponde al Dominio Central o Subandino y su fauna es fundamentalmente brasílica, de filiación subtropical y con marcada influencia patagónica al sudoeste.



### 3. Material y métodos

La colecta de grillotopos se realizó en forma manual y se los colocó individualmente en frascos de vidrio con una cubierta de lienzo. El ejemplar de gordiáceo que emergió del ortóptero fue fijado en alcohol 70%.

A fin de poder observar y estudiar la cutícula, se efectuaron cortes tangenciales de la región central del soma, se retiró la musculatura subyacente y se aclaró con lactofenol. Las regiones anterior y posterior se dibujaron mediante cámara clara en un microscopio monocular Leitz Wetzlar.

Asimismo los extremos y la cutícula de las formas adultas y juveniles fueron metalizados en oro para poder observarlas al microscopio electrónico de barrido, utilizando en esta oportunidad el JEOL JSM 100.

### 4. Observaciones del parásito en el hospedador

En las zonas aledañas al arroyo San Elena, Cortaderas, provincia de San Luis, Argentina (Fig. 1), colectamos varios ejemplares de *Scapteriscus* sp. (grillotopo), a pocas horas de ser capturados, de uno de ellos emergió un ejemplar macho de gordiáceo. Como consecuencia de ello, decidimos realizar una disección del insecto y observamos la presencia de varios ejemplares de nematomorfos en su cavidad general.

Los gordiáceos observados en el interior del grillotopo se encontraban formando un ovillo compacto, que ocupaba no sólo la cavidad abdominal sino que se extendían por debajo de la quitina en la zona dorsal envolviendo la masa visceral (Figura 2A). Al extraer los parásitos algunos se fragmentaron pero no afectaron la posibilidad de estudiarlos, todos correspondían a formas juveniles (Figura 2B). Posteriormente observamos que el sistema digestivo del ortóptero se hallaba fuertemente comprimido, las ovariolas y los tubos de Malpighi prácticamente destruidos y una ausencia total de cuerpos grasos. Analizando los daños producidos sobre el hospedador consideramos que sus posibilidades de sobrevivir eran prácticamente nulas.

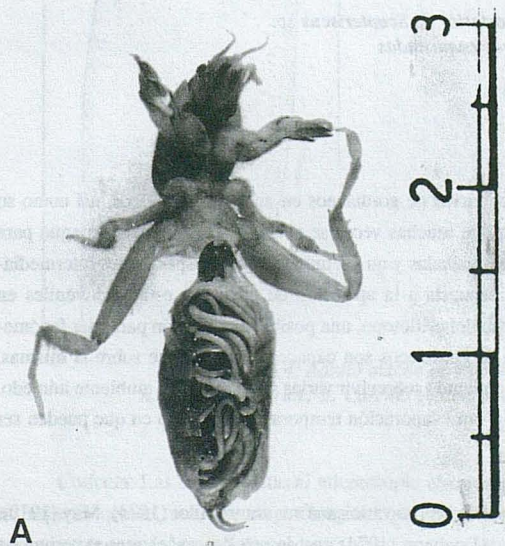


Figura 2A: Vista de la cavidad abdominal de *Scapteriscus* sp. con Gordiáceos



Figura 2B: Ovillo de formas juveniles extraídos del grillotopo



En la zona pleural del cuarto segmento abdominal se detectó una perforación por la que suponemos se produjo la salida del ejemplar adulto observado.

Examinando el sistema digestivo del grillotopo notamos sobre la superficie externa del intestino posterior, la presencia de formas quísticas (Figura 3). Estos quistes se presentan como cuerpos lenticulares de diferentes dimensiones. En mucho de ellos pudimos observar un espacio periférico claro y en el centro replegada la larva. Dichas formas larvales posiblemente no hayan podido desarrollarse debido al gran número de parásitos que ingresaron al hospedador.



Figura 3: Intestino posterior de *Scapteriscus* sp. con larvas enquistadas

Si bien es fácil explicar la penetración de las larvas de gordiáceos en animales acuáticos, así como su aparición en invertebrados terrestres carnívoros, ya que muchas veces se acercan a los cuerpos de agua para alimentarse de especies acuáticas que pueden estar parasitadas y que actuarían como hospedadores intermedios o vectores, resulta más difícil dar una clara respuesta a la aparición de quistes o estados juveniles en invertebrados terrestres no carnívoros, como es el caso del grillotopo, una posible explicación para este fenómeno podría ser, que en muchas ocasiones las larvas de gordiáceos son capaces de replegarse sobre sí mismas, secretar mucus y enquistarse fijándose a un sustrato pudiendo sobrevivir varias semanas en un ambiente húmedo, resultado de las oscilaciones del nivel de las aguas o por evaporación temporaria, momento en que pueden ser ingeridas por formas terrestres herbívoras.

Nuestras observaciones concuerdan con las realizadas por varios autores como Villot (1874), May (1919), Müller (1927), Dorier (1930), Inoue (1962), Poinar y Doelman (1974) que desarrollan excelentes experiencias sobre la biología de los gordiáceos.



## 5. Descripción del parásito

### *Neochordodes puntanus* n. sp.

**Diagnosis:** Cilíndricos. Extremo anterior afinado con la boca terminal central. Extremo posterior curvado con cloaca ventral subterminal. Surcos longitudinales poco evidentes. Cutícula con aréolas de un solo tipo, ovoides con el espacio interareolar estrecho, con tubérculos espiniformes curvados o rectos.

**Descripción:** Holotipo macho. Soma cilíndrico. Color castaño. Extremo anterior afinado gradualmente hacia el ápice, borde dital redondeado; la calota no se diferencia del resto del soma. La boca ocupa el centro del borde anterior y se prolonga hacia el interior por un corto tubo (Figura 4), que se evidencia por transparencia; el diámetro a nivel de la finalización del tubo digestivo es de 0,183 mm. Los surcos longitudinales dorsal y ventral son poco marcados. Extremo posterior curvado con una leve depresión en la faz ventral donde se encuentra la cloaca, a una distancia de 0,256 mm del posterior.

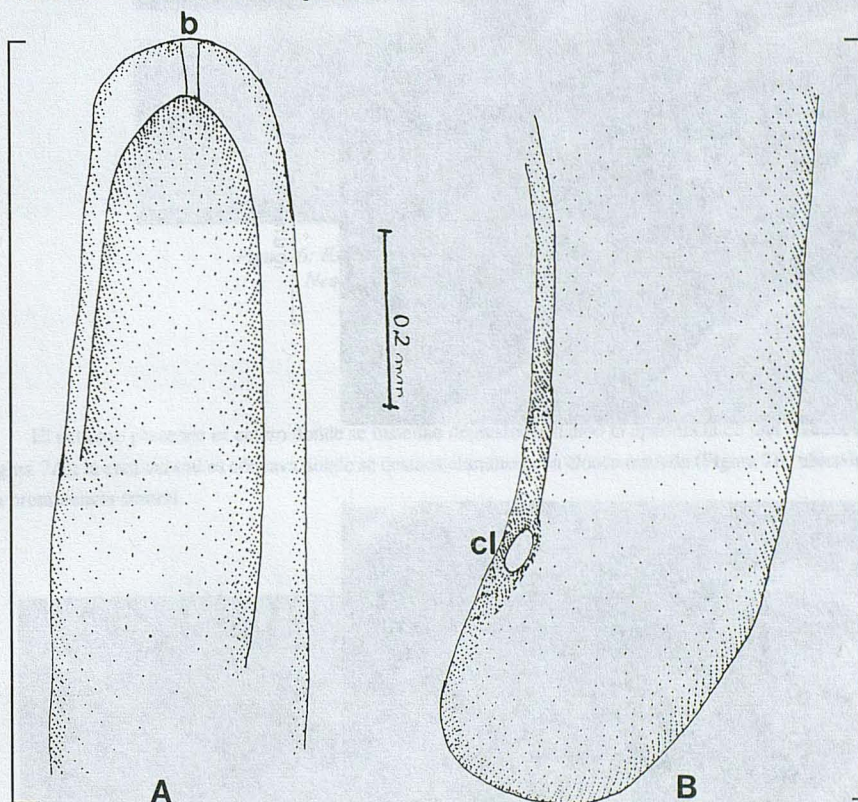


Figura 4: Adulto macho de *Neochordodes puntanus* n. sp.  
A: extremo anterior; B: extremo posterior. Referencias: b = boca, cl = cloaca

**Cutícula:** Las aréolas vistas al microscopio electrónico de barrido a 3.500 aumentos (Figura 5) muestran un aspecto ovoide, una con mayor longitud que otras, pero todas similares, aunque esporádicamente suelen aparecer algunas más pequeñas redondeadas o rectangulares que se disponen en forma alternada o lineal en sentido longitudinal.



De cada una de las aréolas parten finas prolongaciones que las conectan longitudinal y transversalmente originando una delicada estructura en forma de red. Las prolongaciones que unen a las aréolas longitudinalmente son más compactas, están más unidas y el número de ellas varía entre 4 a 9 filamentos. Las prolongaciones transversales son menos numerosas y están separadas unas de otras variando entre 3 y 7 filamentos; algunos de ellos están ramificados o bifurcados, unos son más gruesos y otros delgados. Entre estas uniones se observan espacios anhistos.

Ciertas aréolas presentan uno de los extremos henchido, mientras que el opuesto tiene dos cortas prolongaciones, entre las que emerge un tubérculo curvado en la misma dirección que siguen las prolongaciones areolares. Los tubérculos interareolares pueden presentar el extremo distal curvado y redondeado o bien recto y aguzado. El espacio interareolar es estrecho, presenta tubérculos espiniformes curvados o rectos que sobrepasan en alto a las aréolas.

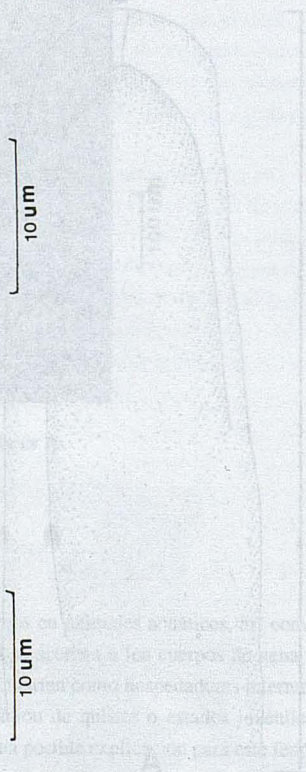
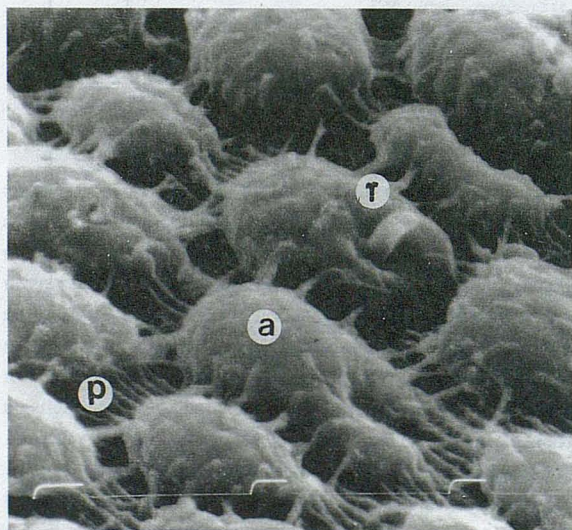
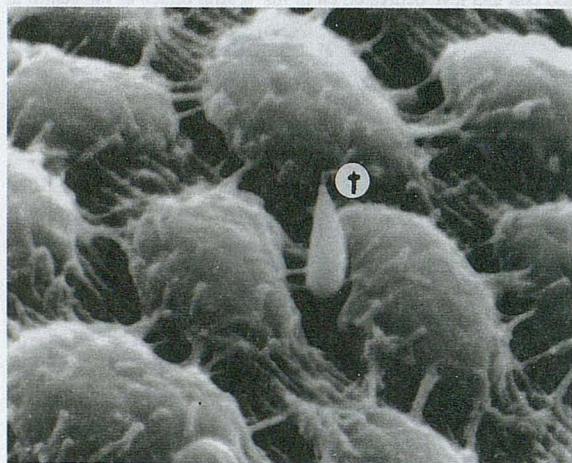


Figura 5: Cutícula de *N. puntanus* n. sp. por 3.500 aumentos.  
Referencias:  
a = aréola  
t = tentaculo  
p = prolongaciones



Material examinado: Holotipo 1 macho de 87mm de largo y 0,439mm de ancho medio. Paratipos 2 hembras juveniles y 3 machos juveniles; col. Miralles, 31-1-1985. Localidad: Argentina, provincia de San Luis, Arroyo Santa Elena.

Hospedador: *Scapteriscus* sp. Scudder.

### 5.1 Formas juveniles

El extremo anterior de los machos (Figura 6) se afina gradualmente hacia el ápice, la boca se encuentra situada justamente en el centro del extremo.

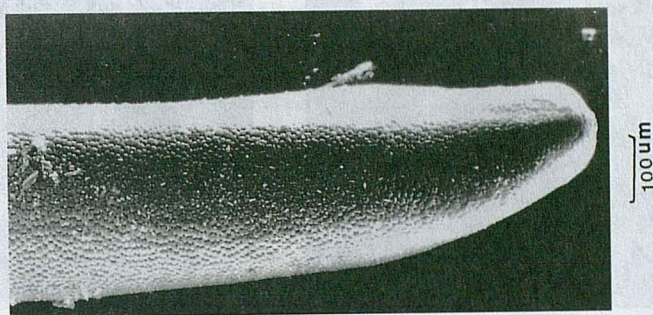


Figura 6: Extremo anterior de macho juvenil de *Neochordodes puntanus* n. sp.

El extremo posterior es entero donde se insinúan depresiones dando la apariencia de una semilobulación (Figura 7A); la cara ventral es cóncava donde se destaca claramente la cloaca ovalada (Figura 7B) ubicada sobre una prominencia central.

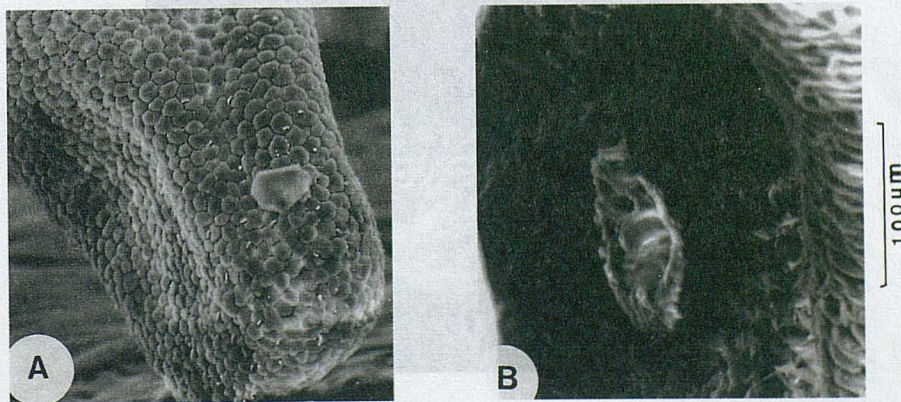


Figura 7: Extremo posterior de macho juvenil de *Neochordodes puntanus* n. sp.  
A: parte terminal; B: cloaca



El extremo anterior de las hembras (Figura 8A) tiene las mismas características señaladas para los machos. La boca está rodeada por una corona de aréolas (Figura 8B) y por varios círculos de tubérculos espiniformes.

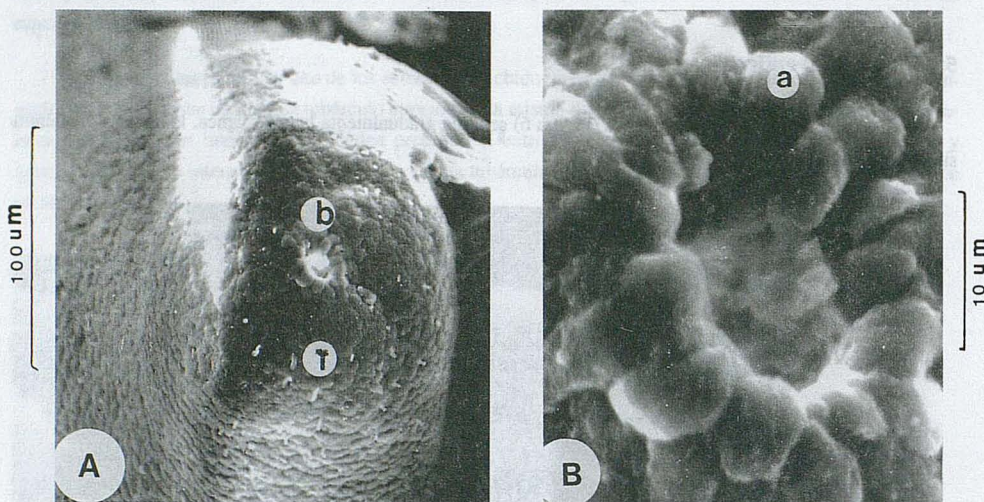


Figura 8. A: extremo anterior de hembra juvenil de *N. puntanus* n. sp. B: boca.  
Referencias: b = boca; a = aréolas; t = tubérculos.

El extremo posterior es algo más turgente que el resto del soma, su borde es redondeado, evidenciándose en el centro la cloaca circular (Figura 9).

La cutícula en estas formas juveniles presenta las mismas características que el adulto.



Figura 9. Extremo posterior de hembra juvenil de *N. puntanus* n. sp. Referencias: c = cloaca



## 6. Discusión

El género *Neochordodes* se caracteriza por presentar un solo tipo de aréolas, generalmente poligonales u ovoides y bajas; los surcos interareolares pueden o no presentar cerdas, procesos hialinos u otras estructuras.

Analizando comparativamente las características cuticulares de las especies que integran el género podemos señalar que *Neochordodes puntanus* presenta una morfología peculiar caracterizada por presentar un solo tipo de aréolas ovoides de borde liso; además, en el espacio interareolar se destacan tubérculos espiniformes que sobrepasan la altura de las aréolas siendo este espacio sumamente estrecho.

*N. puntanus* n. sp. difiere de *N. colombianus* Faust y Ramos (1960) ya que en este último las aréolas son circulares con una estructura suprareolar que se dispone centralmente; de *N. talensis* (Camerano, 1897) por las aréolas papilares altas y el espacio interareolar presenta granulaciones numerosas; de *N. uniareolatus* Carvalho (1946), por la forma poligonal de sus aréolas y por el espacio interareolar estrecho y de *N. nietoi* (Caballero y Caballero, 1936) por la presencia de aréolas con contornos regulares y superficie aplanada, con distribución irregular en el soma.

En base a lo expuesto consideramos que los ejemplares estudiados poseen características bien distintivas y los consideramos como una nueva especie a la que designamos *Neochordodes puntanus*.

La elección del nombre de la especie está dedicado a los habitantes de la Provincia de San Luis a los que se les designa con el nombre de puntanos.

## Agradecimientos

Las autoras agradecen a la Dra. Zulma A. de Castellano y al Dr. Sixto Coscarón las sugerencias y lectura crítica del manuscrito.



## Bibliografía

- Caballero y Caballero, E. (1936). Contribución al conocimiento de los *Gordius* de México. *An. Inst. Biol. Univ. Auton. México*. 7 (4): 477-488.
- Camerano, L. (1897). Viaggio del Dott. Alfredi Borelli nel Chaco boliviano y nella Republica Argentina. *Boll. Mus. Zool. Anat. comp.* 12 (294): 2.
- Carvalho, J.C. (1942). Studies on some Gordioidea of North and South America. *J. Parasit.* 28 (3) 213-222.
1946. Gordiáceos do Museu de Historia Natural de Montevideo. *Com. Zool. Mus. Hist. Nat. Montevideo* 2 (32):3
- Dorier, A. (1930). Recherches biologiques et systematiques sur les gordiaces. *Ann. Univ. Grenoble (NS)* 7 (1):1-183.
- Faust, E.C. y Botero Ramos, D. (1960). Extraordinario hallazgo de una nueva especie de *Neochordodes* (Gordiaceae) Colombia. Libro de homenaje al Dr. Caballero y Caballero, Jubileo 1930-1960. Inst. Politécnico Nac. México. 523-527.
- Inoe, Y. (1962). Studies on the life history of *Chordodes japonensis* a Species of Gordiaceae. III The mode of infections. *Annotations Zool. Japonensis*. 35 (1): 12-19.
- May, H.G. (1919). Contributions to the life histories of *Gordius robustus* Leidy and *Paradorgius varius* (leidy). *Illinois Biol. Monographs*. 5(2) : 7 - 118.
- Müller, G.W. (1927). Über Gordiaceen. *Z. Morph. Okol. Tiere*, Berlín 7: 134 - 219
- Poinar, G.O. y Doelman J.J. (1974). A reexamination of *Neochordodes occidentalis* (Montg) Comb. n. (Chordodidae Gordioidea). Larval penetration and defense reaction in *Culex pipiens* L. *Jour. Parasit.* 60 (2) : 327 - 335.
- Ringuelet, R. (1961). Rasgos fundamentales de la Zoogeografía de la Argentina. *Physis* 22 (63): 151 - 170.
- Villot, A. (1874). Monographie des Dragonneaux du Museum de histoire naturelle de Pais. *Archiv. zool. exper. et gen.* 3 : 39 - 72.