

REVISTA
DE LA

ACADEMIA DE CIENCIAS

Exactas
Físicas
Químicas y
Naturales
DE
ZARAGOZA



Serie 2.^a
Volumen 54

1999

ÍNDICE DE MATERIAS

	Págs.
Premios de la Academia a la investigación (1998-99)	
Pilar Cea, M. ^a Carmen López y Félix M. Royo. —Preparación de sólidos bidimensionales y su caracterización con microscopía de barrido electrónico.....	5
M. ^a Teresa Muiño-Blanco y José A. Cebrián-Pérez. —Un nuevo método de separación de espermatozoides del plasma seminal. Obtención de espermatozoides ovinos de alta motilidad, viabilidad y heterogeneidad superficial.....	31
Ana Algarate y Pilar Andreu. —Factores que afectan el aislamiento y cultivo de protoplastos de <i>Prunus armeniaca</i>	47
Artículos publicados	
José L. Viviente. —Notice historique de l'Academie de Sciences Exactes, Physiques, Chimiques et Naturelles de Zaragoza.....	63
Concepción Romo. —Enseñanzas de la Academia de Matemáticas de Madrid (Creada por Felipe II).....	75
Ioannis K. Argyros. —Accessibility of solutions of equations on Banach spaces by a Newton-like methods and applications.....	83
Ioannis K. Argyros. —Accessibility of solutions of equations on Banach spaces by a Stirling-like method.....	93
Ioannis K. Argyros. —Error bounds for the Halley-Werner method in Banach spaces.....	99
Ioannis K. Argyros. —On a two-point Newton method in Banach spaces and the Pták error estimates.....	111
María José Cantero. —Estudio comparativo de familias de polinomios ortogonales relativas a la circunferencia unidad.....	121
Pedro J. Miana. —Cálculo Fraccionario y el Problema Abstracto de Cauchy.....	131
Pedro J. Miana. —Spectral Theory for Representations.....	143
M. Ruiz Espejo. —Un estimador robusto con información auxiliar univariante.....	161
M. Ruiz Espejo. —A review of the equilibrium concept.....	165
Juan J. Prieto. —Una revisión en dos métodos eficientes Bootstrap.....	171
M. Vázquez-Prada y A. F. Pacheco. —Stochastic model of growth with an explicit mesoscopic length.....	175
C. Longás. —Resolución de problemas astronómicos por medio del entorno MATLAB.....	185
G. Martín Martínez y R. C. Díaz Ara. —Comparación de métodos analíticos en la determinación de parámetros de calidad de vinod. Parte II: Determinación de aniones.....	199
Perfecto Villanueva e Ignacio Canudo. —Los Discorbaceos y los Rotaliaceos (Foraminiferida) del margen septentrional del Golfo de Cádiz.....	205
Acero, P., Mandado, J., Sanz, F. J. y Torrijo, F. J. —Anomalías geoquímicas de Pb y Cu en la Cabecera del río Huerva: Implicaciones medioambientales.....	245
Acero, P., Mandado, J., Sanz, F. J. y Torrijo, F. J. y Bona, M. E. —Génesis de nódulos carbonatados en la formación Turmiel, Ricla (Zaragoza).....	259
Acero, P., Mandado, J., Sanz, F. J. y Torrijo, F. J. —Control de la calidad de datos geoquímicos. Aplicación a la red de drenaje de la Cuenca Alta del río Huerva (Cordillera Ibérica).....	275
Acero, P., Mandado, J., Sanz, F. J. y Torrijo, F. J. —Establecimiento de los valores de fondo y umbral de anomalía geoquímica: Aplicación al estudio de la Cuenca Alta del río Huerva (Cordillera Ibérica).....	285
Notas necrológicas.....	293

Preparación de sólidos bidimensionales y su caracterización con microscopía de barrido electrónico

Pilar Cea, M^a Carmen López y Félix M. Royo

Departamento de Química Orgánica y Química Física.
Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza

Premio de la Academia a la investigación (1998-99)

Resumen:

En este trabajo se presenta un estudio sobre la morfología de películas de Langmuir-Blodgett (LB) de distintas moléculas utilizando la microscopía de barrido electrónico (SEM). Esta técnica nos ha permitido una observación directa de las películas que aporta una visión gráfica, sencilla e intuitiva de la morfología de las mismas. Así este estudio ha posibilitado la determinación del grado de homogeneidad de las películas, el carácter miscible o inmiscible de películas mixtas, la existencia de microdominios y el tamaño de los mismos, etc. En definitiva, se ha puesto de manifiesto que la microscopía de barrido electrónico es una valiosa técnica dentro del conjunto de métodos experimentales para la determinación del grado de orden y arquitectura de películas ultradelgadas.

Abstract:

In this paper we introduce a scanning electron microscopy (SEM) study about the morphology of several molecules arranged in Langmuir-Blodgett films. The SEM technique has allow us a direct observation of the films obtaining photographs that has made possible the determination of the homogeneity degree, the miscible or inmiscible character of mixed films, the presence of microdomains as well as their size, and so forth. It is remarkable that the scanning electron microscopy constitutes a valuable technique in the set of experimental methods to determine the order degree and the architecture of ultrathin films.

Introducción

Las propiedades de los iones, los átomos o las moléculas ensamblados en un sólido perfectamente ordenado pueden ser (y de hecho generalmente lo son), drásticamente distintas de las que presentan como especies individuales. Podríamos comparar este hecho con el comportamiento de los seres humanos como "individuos" y como miembros de una sociedad, formando parte de actividades tan distintas como una fiesta en familia, un desfile militar, o una gala benéfica.

Si hay algo en lo que toda la comunidad científica está de acuerdo, es en que para cualquier sistema físico, sus propiedades macroscópicas y su comportamiento están determinados por su estructura y por sus interacciones a un nivel microscópico. Por ello, si algún día somos capaces de controlar la estructura, arquitectura e interacciones existentes a un nivel molecular también seremos capaces de diseñar y construir materiales con las propiedades fisicoquímicas deseadas. Este concepto, el de orden a nivel molecular, ha dado lugar al nacimiento de un nuevo término: NANOTECNOLOGÍA.

Podríamos definir la nanoquímica como la técnica que nos permite la construcción de edificios moleculares perfectamente ordenados donde los ladrillos son átomos, moléculas, o iones. La preparación de materiales bajo unas estrictas condiciones de manipulación "átomo a átomo" o "molécula a molécula" nos puede permitir la obtención de sustancias con interesantísimas propiedades debidas al elevado grado de ordenación a un nivel microscópico. Entre los potenciales campos de aplicación de estos nuevos materiales podemos citar la óptica no lineal, obtención de sistemas fotoconductores y semiconductores, dispositivos electrónicos, sensores químicos, almacén y procesamiento de datos, imitación de membranas celulares, etc.

Con el objeto de construir dichos edificios moleculares se han diseñado diversos procedimientos en función de la naturaleza y propiedades de la sustancia con que se desea trabajar. Uno de ellos es la técnica de Langmuir-Blodgett (LB) para la obtención de películas constituidas por moléculas orgánicas¹⁻⁷. Una de las principales ventajas de esta técnica es la obtención de películas con un espesor perfectamente controlado, y del orden de unos cuantos diámetros moleculares, es decir, películas ultradelgadas. El control del espesor de las películas y del orden dentro de cada capa convierte a estos materiales en nanoestructuras útiles en campos tan diversos como la óptica, la electrónica, o la preparación de sensores químicos y bioquímicos.

En consecuencia, a los químicos se nos plantea un doble reto. En primer lugar, la síntesis de nuevos materiales con interesantes propiedades fisicoquímicas, y en segundo lugar la organización de dichos materiales en nanoestructuras correlacionando la arquitectura de los mismos con sus propiedades. Solo con un detallado estudio de una

amplísima gama de materiales, y usando diversas técnicas de caracterización de los sólidos obtenidos, podremos dirigirnos de forma clara al diseño de estructuras de interés tecnológico.

Objetivos

El primer objetivo que nos fijamos es la elección de materiales orgánicos que exhiban interesantes propiedades ópticas, eléctricas o magnéticas en estado sólido, y que puedan verse potenciadas mediante su organización en películas LB. En principio, lo ideal es la utilización de moléculas anfipáticas o anfifílicas, es decir, moléculas que contienen un grupo polar que permita el anclaje de estas sustancias sobre la superficie acuosa, y una parte hidrofóbica que les confiera insolubilidad total en el agua. No obstante también pueden utilizarse moléculas completamente hidrofóbicas, siempre que se mezclen con moléculas anfifílicas de modo que la mezcla forme una monocapa estable.

En este trabajo presentamos el estudio de varias moléculas (ver tabla I) que pueden ser clasificadas en dos grandes grupos en función de su naturaleza:

- 1) Derivados del tetratíafulvaleno (TTF).
- 2) Derivados del fósforo conteniendo uno o dos grupos amino.

El tetratíafulvaleno (TTF) y sus derivados constituyen una de las sustancias más ampliamente estudiadas y utilizadas en la química de los materiales moderna ⁸⁻¹¹. Entre las propiedades más interesantes que presenta podemos destacar su accesibilidad sintética, su comportamiento como donador electrónico, el efecto estabilizante en radicales y especies cargadas así como las fuertes interacciones intermoleculares en estado sólido debidas al solapamiento π ¹². Teniendo en cuenta estas propiedades nos hemos propuesto el estudio del TTFH con vistas a su posible utilización como sensor molecular, y conductor o semiconductor orgánico en películas ultradelgadas.

El segundo grupo de moléculas consideradas, compuestos orgánicos derivados del fósforo conteniendo uno o dos grupos amino, son muy interesantes por sus posibles aplicaciones como cationes de sales de compuestos orgánicos conductores y semiconductores (por ejemplo sales de TCNQ, tetracianoquinodimetano) ¹³⁻¹⁵, y también pueden ser utilizados como esponjas protónicas ¹⁶. Debido al comportamiento de estas sustancias en la superficie acuosa como monocapas ionizadas positivamente, es posible incluir en la subfase algún anión, con determinadas propiedades objeto de nuestro interés, y transferirlo como contraión del derivado fosforado para mantener la electroneutralidad del sistema. De ese modo podríamos incorporar un anión con

determinadas propiedades de interés en la película LB, es decir, en una estructura ordenada donde dichas propiedades se vean potenciadas.

El segundo objetivo es la obtención de sólidos bidimensionales empleando la técnica LB. Para ello en primer lugar es necesario preparar una monocapa sobre la superficie acuosa en las mejores condiciones experimentales para la obtención de monocapas con un alto grado de organización molecular y de estabilidad. Dichas condiciones (características del proceso de dispersión, volumen y concentración de la disolución a dispersar, tipo de disolvente, velocidad de barrido, pH de la subfase acuosa, temperatura de la subfase, temperatura de la habitación, etc) deben determinarse experimentalmente para cada molécula. Una vez preparadas las monocapas en la superficie acuosa, se transfieren sobre sustratos sólidos obteniendo así una multicapa con el número de capas y el espesor deseado. Dichas multicapas reciben el nombre de películas de Langmuir-Blodgett.

Finalmente, **el tercer objetivo** será la caracterización de dichas películas con el fin de determinar el grado de orden y estructura de las mismas, correlacionando los tres puntos claves de nuestra investigación: condiciones de fabricación, arquitectura, y propiedades fisicoquímicas de las películas obtenidas, para dirigirnos de forma adecuada en la construcción de las multicapas y la búsqueda de sus posibles aplicaciones. Existe una larga lista de técnicas de caracterización (espectroscopía ultravioleta-visible, de fluorescencia, infrarrojos, RAMAN, espectroscopía Auger, difracción de rayos X, resonancia de spin electrónico, voltametría cíclica, etc) que deben emplearse simultáneamente para obtener una información completa y fiable sobre la disposición de las moléculas en las películas LB. Entre dichas técnicas de caracterización, se encuentra la microscopía de barrido electrónico (SEM), que nos aporta una visión gráfica, sencilla e intuitiva de la morfología de las películas. En este trabajo queremos subrayar como esta técnica de caracterización nos ha permitido obtener una valiosa información sobre el grado de homogeneidad de las películas, que en cambio ninguna otra técnica de caracterización nos proporciona y, asimismo, con la interpretación de las imágenes obtenidas hemos completado y corroborado hipótesis planteadas a partir del uso de otras técnicas.

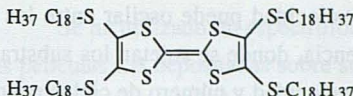
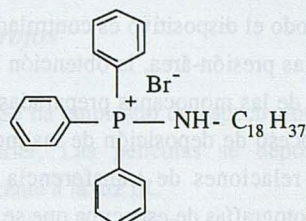
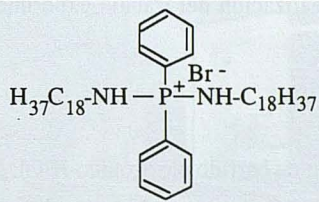
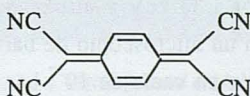
Molécula	Nombre	Abreviatura
	Tetrakis(octadeciltio) tetratiafulvaleno	TTFH
	Bromuro de trifenil (octadecilamino)fosfonio	TPOBr
	Bromuro de difenildi (octadecilamino)fosfonio	DPOBr
	Tetracianoquinodimetano	TCNQ

TABLA I. Moléculas empleadas en la preparación de las películas LB presentadas en este trabajo.

Dispositivos experimentales

Cuba de Langmuir

La cuba de Langmuir y el software que la controla han sido diseñados y creados por personal de nuestro grupo de investigación¹⁷. La cuba se encuentra situada en un sótano para minimizar las vibraciones. Asimismo el laboratorio dispone de doble ventana y doble puerta para evitar la entrada de polvo, y la limpieza de este laboratorio es realizada periódica, cuidadosa y escrupulosamente por el propio investigador. La cuba está introducida en una vitrina con puertas correderas de cristales ahumados, que la preservan, aún más si cabe dadas las condiciones del laboratorio, de la contaminación causada por el polvo y la luz. Las dimensiones de la cubeta son 210x460 mm² y está formada por un bloque de teflón consolidado por una armadura metálica. La profundidad es de 8mm, excepto en el pozo de transferencias donde es de 25mm.

Además de la cubeta dispone de otros accesorios como el medidor de la presión superficial, que se basa en el método del platillo del Wilhelmy. La barrera móvil que puede ser controlada desde el ordenador y cuya velocidad puede oscilar entre los 57 mm/min y 0.6 mm/min. El brazo para la transferencia, donde se sujetan los substratos sobre los que se depositarán las monocapas, cuya velocidad y número de ciclos pueden ser fijados previamente, y modificados durante la transferencia si fuera necesario. La velocidad puede oscilar entre 1 y 10 mm/min. Todo el dispositivo es controlado por un ordenador que permite el registro de las isothermas presión-área, la obtención de ciclos de histéresis, la determinación de la estabilidad de las monocapas preparadas sobre la superficie acuosa, el control automático del proceso de deposición de las monocapas sobre substratos sólidos y el cálculo de las relaciones de transferencia en cada experiencia. En la figura 1 se muestran algunas fotografías de esta cuba que se acaba de describir brevemente, y que se ha utilizado en la realización del trabajo experimental que presentamos.

Microscopio de barrido electrónico

En este trabajo se ha utilizado un microscopio de barrido electrónico JEOL JSM 6400. Su resolución es de 3.5 nm para el máximo número de aumentos (300.000), utilizando un haz de electrones con una energía mayor a 35 keV y utilizando 8 mm como distancia del foco de electrones a la muestra. En un microscopio de barrido, un haz de electrones con una energía entre 1 y 50 keV y en un vacío de 10^{-7} bar se hace incidir sobre una muestra gruesa, opaca a los electrones. Este haz electrónico se focaliza sobre la superficie de la muestra, describiendo un conjunto de líneas paralelas. Como resultado de la interacción de los electrones incidentes con la muestra, se producen una serie de fenómenos, entre los que cabe destacar aquí, la emisión de electrones secundarios con energías de unas pocas decenas de eV y la reflexión de los electrones primarios que dan lugar a un haz de electrones retrodispersados de alta energía. Los electrones secundarios penetran menos en la muestra, mostrándonos la morfología de su superficie, mientras que los electrones retrodispersados tienen una mayor capacidad de penetración, por lo cual la fotografía así obtenida presenta distintos niveles de grises en función de la composición química de la muestra.

Las películas se transfirieron sobre substratos de vidrio y sobre ellos posteriormente se vaporizó oro formando una capa de 25 nm. Con este recubrimiento se consigue aumentar la conductividad de la superficie facilitando la circulación de los electrones y minimizando los problemas asociados a la generación de carga.

Ultravioleta-visible

Se ha utilizado un espectrofotómetro Uvikon 941 de doble haz. Los espectros de las películas LB depositadas sobre sustratos de cuarzo se registraron con un ángulo de incidencia normal de la luz.

Infrarrojos

Se ha empleado un espectrofotómetro Nicolet 550, Magna IR con transformada de Fourier. Las películas se depositaron sobre sustratos de fluoruro de calcio, transparente a la luz IR.

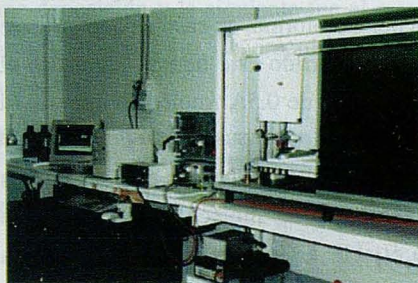


FIGURA 1.a. Visión general del laboratorio.

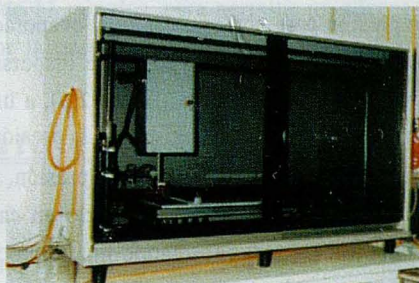
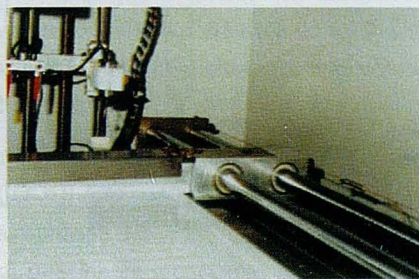


FIGURA 1.b. Cuba de Langmuir-Blodgett



FIGURAS 1.c y d. Detalle de la cuba de Langmuir-Blodgett donde pueden observarse las pinzas con los sustratos para la transferencia, la balanza de Wilhelmy y el sistema de termostatación.

Procedimiento experimental

El líquido utilizado como subfase fue siempre agua millipore-Q con una resistividad de $18.2 \text{ m}\Omega \text{ cm}$. Todas las moléculas consideradas en este trabajo son solubles en cloroformo y se emplearon disoluciones de concentración 10^{-4} M en este disolvente (Sigma/Aldrich. 99.9%, HPLC) para la dispersión de las moléculas sobre la superficie acuosa. Para la realización de las pesadas se utilizó una balanza METLER ME30 (10^{-6} g). El proceso de dispersión se realizó lenta y cuidadosamente, depositando cada gota de disolución muy cerca de la superficie acuosa y dejándola caer muy lentamente (figura 2.a). Se permitió que la presión superficial retornara a 0 mN/m antes de depositar la siguiente gota, para permitir así la evaporación del disolvente. Tras el proceso de dispersión se esperó 15 minutos antes de comenzar el proceso de compresión para conseguir la total evaporación del cloroformo, en caso de que quedase algo a pesar del lento proceso de dispersión. Transcurrido este tiempo comienza el movimiento de la barrera (figura 2.b), a una velocidad de $0.5 \text{ Å}^2/\text{molécula minuto}$. El ordenador obtendrá un registro de la presión superficial (π) versus el área por molécula (A), es decir, una isoterma de compresión. A presiones altas (del orden de 30 mN/m) es de esperar (habrá que comprobarlo en cada caso) que las moléculas se encuentren altamente ordenadas formando una monocapa estable. Es en ese momento cuando la monocapa puede ser transferida sobre un sustrato sólido (figura 3), para formar así una película LB o multicapa (figura 4), es decir, un sólido bidimensional.

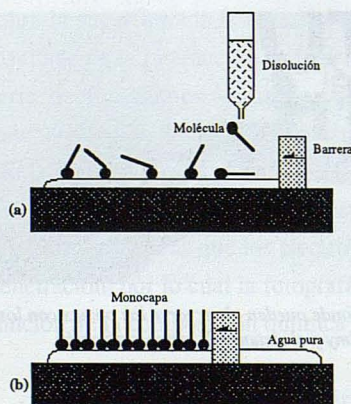


FIGURA 2.a. Proceso de dispersión.

2.b. Proceso de compresión.

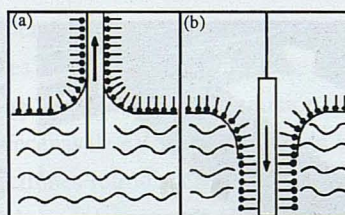


FIGURA 3. Proceso de transferencia.

(a) sustrato hidrofílico; (b) sustrato hidrofóbico

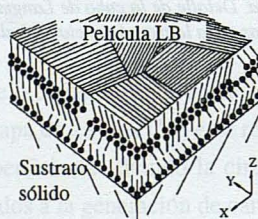


FIGURA 4. Película LB.

La naturaleza del sustrato depende del tipo de caracterización fisicoquímica a que va a ser sometida posteriormente la película LB. En el caso de estudios con el microscopio electrónico el sustrato empleado ha sido un vidrio desnudo de 15x8mm. El proceso de limpieza del vidrio es de vital importancia, ya que cualquier impureza o defecto del vidrio será transmitido a la multicapa, logrando así el efecto contrario al buscado (multicapa perfectamente ordenada). Los sustratos empleados fueron limpiados con acetona (Lab-Scan, 99,8%, HPLC), etanol (Normasolv, 99,0%, HPLC), posteriormente se introdujeron en un recipiente con agua (millipore-Q) y se colocaron en un baño de ultrasonidos durante quince minutos. Esta operación se repitió cuatro veces más y finalmente se secaron.

La velocidad de transferencia fue de 0.2 cm/min y el tiempo transcurrido entre una deposición y la siguiente fue al menos de 11 minutos, para permitir un adecuado secado del sustrato, favorecido además por la presencia de una atmósfera rica en nitrógeno.

Resultados experimentales

TTFH

Como puede observarse en la tabla I ésta es una molécula completamente hidrofóbica que contiene el esqueleto del TTF y cuatro largas cadenas de 18 átomos de carbono. Este carácter completamente hidrofóbico hace que sea absolutamente imprescindible la mezcla de esta molécula con otra que tenga carácter anfifílico y permita su estabilización en la superficie acuosa y por tanto la formación de verdaderas películas de Langmuir, así como la posterior transferencia de dichas monocapas sobre un sustrato sólido para la obtención de las películas LB.

Se ha procedido a la preparación de monocapas mixtas conteniendo el derivado del TTF con ácido behénico ($\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{20}-\text{COOH}$) en distintas proporciones. El ácido behénico (BA) es una sustancia ampliamente estudiada desde los inicios del desarrollo de esta técnica y se sabe que da lugar a la formación de monocapas estables que se pueden transferir a un sustrato sólido con relaciones de transferencia muy próximas a la unidad y dando lugar a películas de Langmuir-Blodgett perfectamente homogéneas, con una arquitectura constante y un alto grado de orden molecular en las cadenas alquílicas⁴.

Se ha comprobado que las monocapas mixtas son mucho más estables que las películas de Langmuir obtenidas dispersando únicamente el derivado del TTF. Esta estabilidad es tanto mayor al aumentar la proporción de ácido behénico. Las monocapas mixtas pueden ser transferidas sobre sustratos sólidos obteniéndose una deposición de

tipo X con una relación de transferencia de 0.9 para (TTFH/BA 1:1) y 0.95 para (TTFH/BA 1:4).

Las películas formadas por dos o más componentes pueden ser clasificadas en tres tipos : (1) Componentes totalmente miscibles; (2) Componentes totalmente inmiscibles; (3) Componentes parcialmente miscibles.

Por lo tanto uno de los factores clave para determinar la arquitectura de las películas TTFH+BA es conocer en cual de los tres casos nos encontramos.

Para el estudio termodinámico de películas mixtas podemos definir el área molecular promedio ideal a una determinada presión, π , como:

$$A_{ideal} = X_1 A_1 + X_2 A_2 \quad (1)$$

donde A_1 y A_2 son las áreas por molécula a la presión π para los componentes puros. Podremos entonces definir el área molecular de exceso como:

$$A^E = A_{real} - A_{ideal} \quad (2)$$

El área de exceso será igual a cero tanto si los componentes son totalmente miscibles como si son totalmente inmiscibles. Por lo tanto la medida de las áreas de exceso sólo nos aportará información sobre si tenemos: i) monocapas totalmente miscibles (mezcla ideal) o totalmente inmiscibles; ii) monocapas parcialmente miscibles.

En el caso de que obtengamos áreas de exceso iguales a cero, para averiguar si se trata de monocapas totalmente miscibles o totalmente inmiscibles será necesario determinar la presión de colapso de las monocapas mixtas. Si las moléculas son perfectamente miscibles, la presión de colapso de la mezcla estará comprendida entre las de las monocapas en el estado puro ¹⁸. En cambio, si se trata de monocapas totalmente inmiscibles entre sí, la presión de colapso de la mezcla será igual a la de la monocapa cuya presión de colapso en el estado puro sea menor .

Sin embargo en el caso de las monocapas mixtas de TTFH+BA no podemos aplicar este criterio, ya que en primer lugar no podemos determinar con exactitud ni el área por molécula ni la presión de colapso para una isoterma de TTFH, puesto que al no ser una molécula anfifílica no forma verdaderas películas de Langmuir sobre la superficie acuosa. Por otra parte para las isotermas de estas monocapas mixtas no es posible determinar la presión de colapso ya que a presiones altas e inferiores al colapso la monocapa se vuelve muy rígida, desplaza el platillo de Wilhelmy y finalmente desborda (parte de la monocapa y de la subfase se salen de la superficie física de la cuba) antes de colapsar. Ninguna otra de las técnicas de caracterización empleadas (Uv-vis, IR, difracción de rayos X y voltametría cíclica) nos han aportado datos claros sobre

la miscibilidad de las películas. Es aquí donde los estudios de microscopía electrónica jugarán un papel fundamental en la determinación de la miscibilidad de estas sustancias en las películas mixtas.

En primer lugar debemos realizar un estudio del sustrato desnudo con el microscopio de barrido electrónico para comprobar la homogeneidad del mismo, y poder proceder de forma adecuada a la interpretación de las imágenes obtenidas para el sustrato cubierto de la película mixta TTFH+BA. En la figura 5 se muestra una fotografía del vidrio desnudo, a 8000 aumentos con electrones retrodispersados.

Asimismo se obtuvieron fotografías de películas de ácido behénico puro, tal y como se muestra en las figuras 6 a 8. El BA conduce a películas LB relativamente homogéneas, y con una apariencia muy similar a la observada anteriormente por otros autores¹⁹. En las figuras 9 a 12 se muestran las fotografías de la superficie de películas mixtas TTFH+BA en la proporción 1:1.

Como puede observarse en estas fotografías las películas mixtas muestran un aspecto muy diferente al de las que contienen sólo ácido behénico, presentando una matriz uniforme sobre la que se asientan "granos" que podrían interpretarse como agregados moleculares de TTFH que se sitúan sobre una superficie homogénea, probablemente constituida por el ácido behénico. Por lo tanto, los estudios de microscopía electrónica indican que el BA y el TTFH forman una mezcla heterogénea.

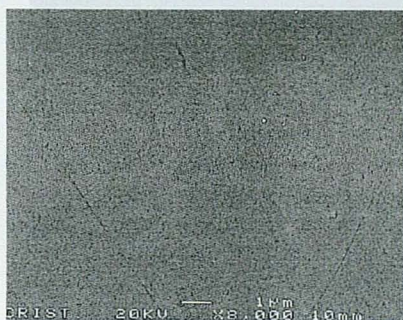


FIGURA 5. Fotografía SEM de un vidrio desnudo, a 8000 aumentos (retrodispersados).

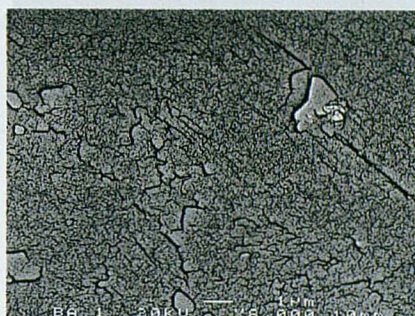


FIGURA 6. Fotografía SEM de una película de ácido behénico puro, registrada a 8000 aumentos, con electrones retrodispersados



FIGURA 7. Fotografía SEM de una película de ácido behénico puro, registrada a 8000 aumentos, con electrones secundarios.

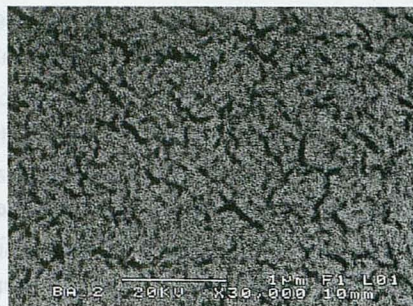


FIGURA 8. Fotografía SEM de una película de ácido behénico puro, registrada a 30000 aumentos, con electrones retrodispersados.



FIGURA 9. Fotografía SEM de una película de TTFH+BA 1:1, registrada a 1400 aumentos (electrones secundarios).



FIGURA 10. Fotografía SEM de una película de TTFH + BA 1:1, registrada a 8000 aumentos (electrones secundarios).



FIGURA 11. Fotografía SEM de una película de TTFH+BA 1:1, registrada a 16000 aumentos (electrones secundarios) donde podemos ver con detalle una de las líneas brillantes observadas en la figura 9.

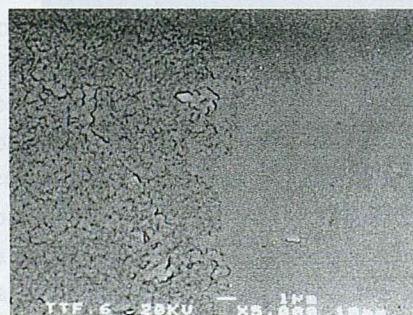


FIGURA 12. Fotografía de una película de TTFH+BA 1:1, registrada a 5000 aumentos con electrones secundarios en la zona límite donde acaba la película para dar paso al vidrio desnudo.

Se ha procedido a un dopaje químico de estas películas con vapores de yodo, comprobándose que dicho dopaje es reversible, es decir, en unos pocos minutos se retorna a la situación original. No obstante durante el proceso de dopaje se producen cambios en las propiedades ópticas y eléctricas de la película por lo que podrían ser utilizadas como sensores de gases que presenten propiedades redox similares al yodo. Así en las figuras 13 y 14 se muestran los espectros Uv-vis e IR que se han registrado durante el proceso de dopaje. Pueden observarse cambios muy claros en la posición e intensidad de las bandas, así como la aparición de otras nuevas.

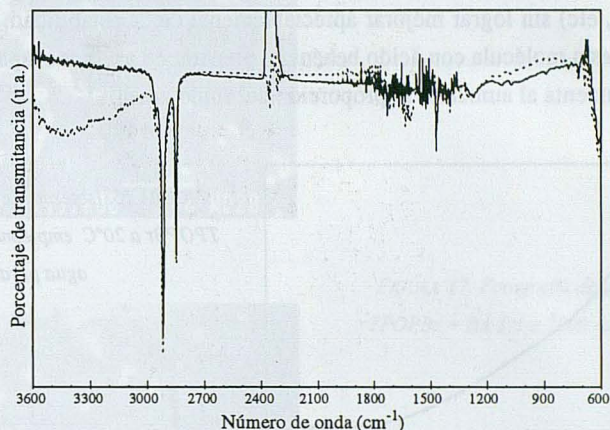


FIGURA 13. Espectro IR de una película LB de TTFH+BA 1:1 con 20 capas.

(a) — antes del dopaje con yodo. (b) inmediatamente después del dopaje con yodo.

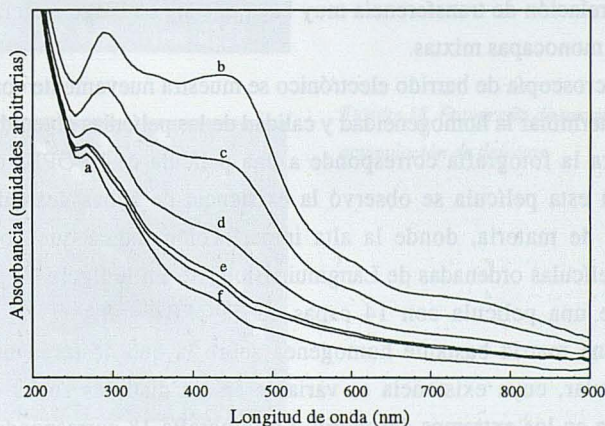


FIGURA 14. Espectro UV-vis de una película de Langmuir-Blodgett constituida por cinco monocapas de TTFH+BA (1:1). (a) Sin dopar; (b) recién sacada del recipiente donde se realizó el dopaje; (c) a (f) espectros registrados cada 15 minutos.

TPOPBr

Esta es una sustancia a priori idónea para la preparación de monocapas y películas de Langmuir-Blodgett, dado que es una molécula anfifílica, con una cabeza polar, y una larga cadena hidrocarbonada. En la figura 15 se muestra una isoterma de esta molécula. Las isothermas son reproducibles, no obstante las monocapas son bastante inestables. Se han modificado las condiciones experimentales (velocidad de barrido, temperatura de la subfase, características del proceso de dispersión, presencia de sales en la subfase, etc) sin lograr mejorar apreciablemente dicha estabilidad. Finalmente se ha mezclado esta molécula con ácido behénico, preparando así monocapas mixtas, cuya estabilidad aumenta al aumentar la proporción del ácido graso.

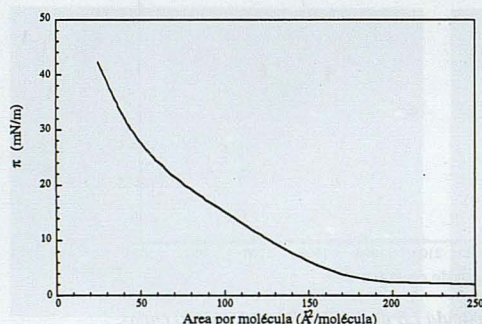


FIGURA 15. Isoterma de compresión de TPOPBr a 20°C empleando como subfase agua pura.

La deposición de las monocapas de TPOPBr puro sobre sustratos sólidos muestra una relación de transferencia muy baja, que sin embargo mejora notablemente en el caso de monocapas mixtas.

La microscopía de barrido electrónico se muestra nuevamente como una técnica clave para determinar la homogeneidad y calidad de las películas obtenidas. En la figura 16 se muestra la fotografía que corresponde a una película de TPOPBr pura, sin ácido behénico. En esta película se observó la existencia de zonas desnudas y zonas de acumulación de materia, donde la alta imperfección indica que no estamos ante verdaderas películas ordenadas de Langmuir-Blodgett. En la figura 17 podemos ver la fotografía de una película con 14 capas de TPOPBr + BA (1:1); en ella puede observarse una matriz bastante homogénea sobre la que destacan unas formas de aspecto granular, cuya existencia es variable en las distintas zonas de la película, especialmente en los extremos del vidrio. La fotografía 18 corresponde a esta misma película en una zona de acumulación de estos defectos.

En resumen, el TPOPBr no es una molécula adecuada para la preparación de películas LB cuando se dispersa sola sobre la superficie acuosa, pero incluso cuando es mezclada con ácido behénico puede observarse la existencia de un elevado número de defectos e imperfecciones que nos hacen admitir que la molécula no es apta para preparar películas LB.

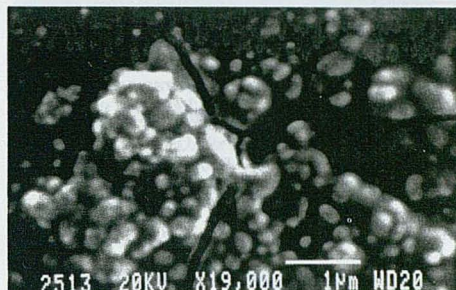


FIGURA 16. Fotografía de una película de TPOPBr pura a 19000 aumentos.

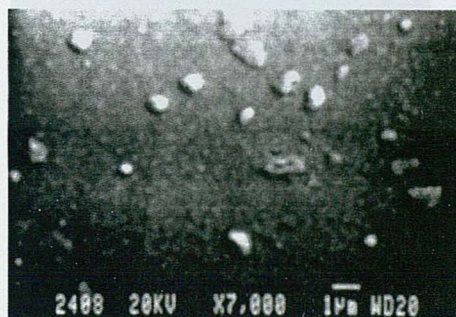


FIGURA 17. Fotografía de una película de TPOPBr + BA 1:1 a 7000 aumentos.



FIGURA 18. Fotografía de una película de acumulación de defectos.

DPOPBr

Como en el caso anterior nos encontramos con una molécula anfifílica, que da lugar a la formación de monocapas ionizadas positivamente en la superficie acuosa. Sus isotermas son reproducibles y en la figura 19 se muestra una isoterma del DPOPBr a 20°C y utilizando agua Millipore-Q pura en la subfase.

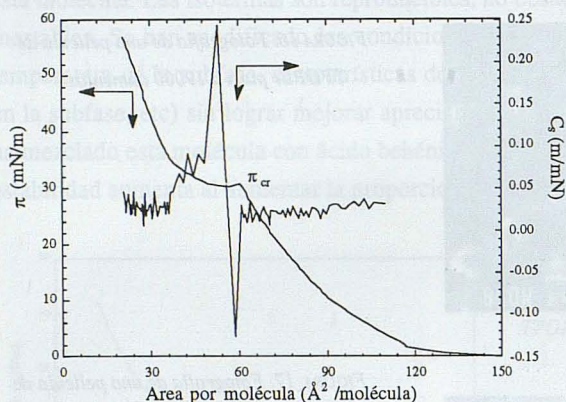


FIGURA 19. Isoterma presión superficial vs área por molécula a 20°C de DPOPBr en agua pura como subfase efectuada a una velocidad de compresión de 1.89 Å²/molécula minuto, y compresibilidad vs área por molécula.

En la referencia ²⁰ puede encontrarse una detallada discusión sobre la interpretación de esta isoterma. Nos interesa señalar aquí que el "plato" que aparece a una presión de unos 30 mN/m se ha interpretado como debido a la formación de una bicapa. Dicha hipótesis ha sido confirmada mediante diversos estudios (Uv-vis, experimentos de histéresis, etc).

Un experimento más que puede aportarnos interesante información sobre la estructura y arquitectura de estas películas antes y después del plato es un estudio con el microscopio de barrido electrónico de dichas multicapas. En las figuras 20 a 26 podemos observar las fotografías tomadas con el SEM en películas transferidas a 30 y a 40 mN/m. El aspecto físico de éstas es diferente. Las películas depositadas a una presión de 30 mN/m son bastante homogéneas, aunque aparecen algunos defectos en las mismas. A 40 mN/m el número de defectos es mayor, mostrando ciertas "islas" que pueden interpretarse como la existencia de cristales en 3D. En otras palabras, antes del plato las películas son bastante homogéneas, indicando la existencia de monocapas bien ordenadas que se transfieren con una arquitectura precisa y constante a lo largo de las distintas capas, mientras que después del plato las películas presentan un mayor número de defectos en su estructura, mostrando la aparición de algunos núcleos de cristalización. En definitiva los estudios con el SEM, sin contradecir las conclusiones a las que se ha llegado por otros caminos, que parecen indicar la formación de una bicapa, indican además que en algunas zonas se ha producido una cristalización, que va más allá de la formación de una bicapa, y que probablemente implica una cristalización en 3D.



FIGURA 20: película LB con 15 capas transferidas a 30 mN/m de DPOPBr a 8000 aumentos con electrones secundarios



FIGURA 21: idem figura 20 con electrones retrodispersados.

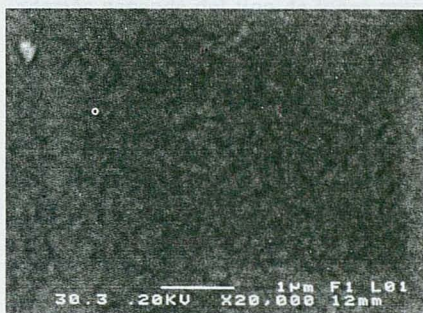


FIGURA 22: película LB con 15 capas transferidas a 30 mN/m de DPOPBr a 20000 aumentos con electrones secundarios



FIGURA 23: idem figura 22 con electrones retrodispersados.

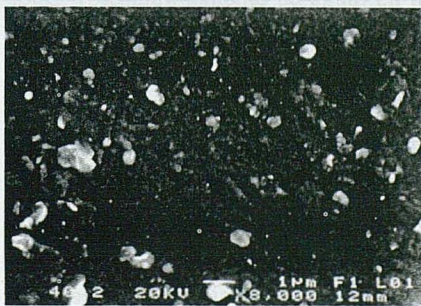


FIGURA 24: película LB con 15 capas transferidas a 40 mN/m de DPOPBr a 8000 aumentos con electrones secundarios



FIGURA 25: idem figura 24 pero a 20000 aumentos.



FIGURA 26: *idem* figura 24 pero a 37000 aumentos.

Durante el estudio de esta molécula en monocapas y películas de Langmuir hay un hecho que llamó poderosamente nuestra atención y para cuya interpretación los estudios de microscopía electrónica han resultado muy útiles. En los siguientes párrafos pasamos a detallar este singular fenómeno.

La disolución de una película LB (transferida a 30 mN/m) en acetonitrilo conduce a un espectro en el que el máximo de absorción está desplazado 5 nm hacia el rojo, respecto al espectro obtenido a partir de la molécula directamente disuelta en acetonitrilo (sin preparar la película LB). Este experimento ha sido repetido en cinco ocasiones, obteniendo resultados idénticos. Para descartar la influencia de la concentración se ha preparado una disolución que de un mismo valor de absorbancia que el obtenido a partir de la película disuelta, observándose que la longitud de onda a la que se produce el máximo de absorción aparece a un valor menor que el correspondiente a una disolución de la molécula sometida a la técnica LB. Aunque esta situación es un tanto sorprendente y no se ha localizado ninguna referencia bibliográfica que describa algún hecho similar, propusimos las siguientes hipótesis:

i) Hidratación del DPOP^+ o de los contraiones del DPOP^+ , durante el proceso de formación de la película LB. La redisolución posterior de esta película (con moléculas de agua hidratando a los iones), podría conducir a un entorno más polar de la molécula orgánica, formación de enlaces por puente de hidrógeno, o bien inducir la formación de agregados en torno a estas moléculas de agua (que estarían favorecidos por el carácter fuertemente hidrofílico del catión).

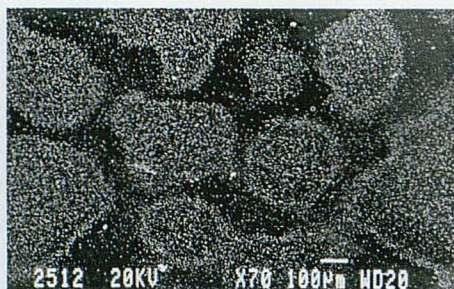
ii) Incorporación de moléculas de agua a la película, debido a un secado defectuoso de la misma. Este hecho podría ser evitado, o cuando menos, minimizado, con una atmósfera muy rica en nitrógeno, que favorezca el secado, o con mayores tiempos de permanencia del sustrato fuera del agua durante el proceso de transferencia, permitiendo así una mejor evaporación del agua entre dos deposiciones consecutivas. No obstante ni tiempos muy largos de secado ni la utilización de nitrógeno parecen tener efecto en el desplazamiento hacia el rojo de la película redisuelta. Aunque el motivo de la incorporación del agua en la película sea diferente al propuesto en el

apartado anterior, las consecuencias en el espectro serían las mismas (al menos cualitativamente).

Se ha realizado una serie consecutiva de espectros en trifluoroetanol como disolvente, donde se han ido añadiendo trazas de agua. Al aumentar la cantidad de agua en la disolución, se produce un claro desplazamiento del espectro hacia el rojo de varios nanómetros. Debemos enfatizar además que se ha comprobado que la disminución en la concentración efectiva de la molécula orgánica al añadir agua a la disolución, no es la responsable del desplazamiento de las bandas, pues se hizo un experimento paralelo donde se disminuía la concentración de la molécula en trifluoroetanol, simplemente añadiendo este disolvente orgánico (pero no agua), sin observar en esta zona ningún desplazamiento del máximo de absorción (es decir, se cumple la ley de Lambert-Beer).

Algunos autores ²¹ han observado la presencia de agua en las películas, que además depende del tipo de iones presentes en la subfase acuosa (contraiones que se incorporan a la película para mantener la electroneutralidad del sistema), lo cual parece apoyar la hipótesis anterior.

Para aportar alguna luz a este fenómeno de incorporación de moléculas de agua a las películas LB se realizó un estudio de las mismas mediante el SEM. Las muestras una vez preparadas se almacenaron de dos formas distintas, unas se colocaron en pinzas expuestas al aire, mientras que otras se guardaron inmediatamente en pequeños frascos herméticos hasta su estudio con el microscopio (el tiempo de permanencia en dichos recipientes fue de unas doce horas). Se comprobó que en el primer caso las películas presentaban una matriz de apariencia homogénea aunque con algunos microdominios desorientados con respecto al plano del sustrato, cuyo tamaño es del orden de 1 μm . No obstante se observó que si las películas se guardaban en un recipiente cerrado, las multicapas presentaban un aspecto completamente diferente, con gotas (presumiblemente de agua) en la superficie que se podían observar a simple vista. Las figuras 27 a 29 muestran las fotografías obtenidas con el microscopio electrónico en películas guardadas en un recipiente hermético, que presentan un aspecto completamente distinto a las mostradas en las figuras 20-26 correspondientes a películas guardadas al aire.



27. SEM de una película LB de 15 capas de DPOPBr con 70 aumentos. Esta película fue guardada en un recipiente cerrado. Puede observarse un número "infinito" de defectos en la estructura de la película.

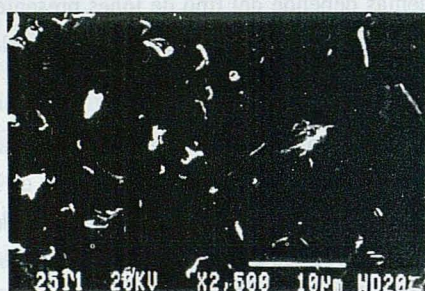


FIGURA 28. idem figura 27 pero a 1000 aumentos FIGURA 29 idem figura 27 pero a 2500 aumentos

DPOPBr + TCNQ

Hemos descartado el estudio del TPOPBr en películas LB, pero en cambio el DPOPBr se ha mostrado como una molécula que da lugar a monocapas extremadamente estables en la superficie acuosa, transferibles sobre un sustrato sólido, dando lugar a películas LB muy homogéneas, especialmente si las transferimos antes del plato que aparece en la isoterma. Como hemos dicho anteriormente el catión DPOP^+ puede actuar como contraión en sales de compuestos orgánicos conductores y semiconductores, por ejemplo sales de tetracianoquinodimetano (TCNQ). Por ello nos ha parecido muy interesante el estudio del DPOP^+ incorporando TCNQ^- en la subfase para así preparar películas LB que pudieran presentar propiedades conductoras o semiconductoras.

Se han preparado disoluciones de LiTCNQ , que se han empleado como subfase acuosa y sobre estas se ha dispersado DPOPBr. Según nuestro conocimiento sobre el tema esta es la primera vez que se intenta preparar una película LB conteniendo TCNQ incorporándolo directamente de la subfase acuosa en lugar de dispersarlo sobre la

misma. Este hecho presenta diversas ventajas, entre las que podemos destacar un control más exhaustivo de la estequiometría de la nueva sal formada, y la no necesidad de añadir al TCNQ largas cadenas hidrocarbonadas que a su vez pueden suponer un importante impedimento para la conductividad.

Las monocapas obtenidas son muy estables y al transferir sobre sustratos sólidos incorporan TCNQ^- para mantener la electroneutralidad del sistema. En las figuras 30-35 se muestran fotografías de películas depositadas a distintas presiones de transferencia.

Teniendo en cuenta la bibliografía publicada sobre el tema, parece ser que para obtener películas LB conteniendo TCNQ que presenten una importante conductividad eléctrica es necesario: i) Las películas estén constituidas por microcristales muy delgados y con forma de agujas, de modo que la distancia entre estos microcristales a su vez permita la conducción; ii) El TCNQ se encuentre formando dímeros $(\text{TCNQ}^-)_2$ con sus planos moleculares paralelos al sustrato; iii) El proceso de iodación induzca una reorganización estructural de modo que los planos de TCNQ se dispongan prácticamente perpendiculares a la superficie.

Para la determinación del primer punto la microscopía de barrido electrónico se manifiesta probablemente como la única herramienta válida para confirmar este punto. Como puede observarse en las fotografías la aparición de microcristales esta supeditada tanto a la concentración de la subfase como a la presión de transferencia.

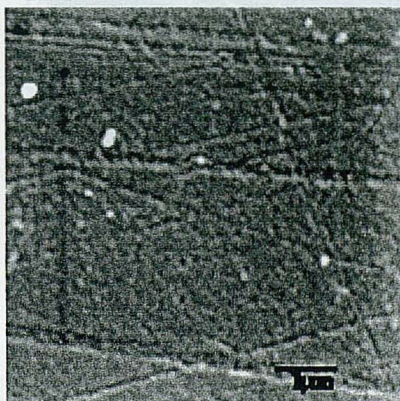


FIGURA 30: Fotografía de 20 capas de $\text{DPOP}^+\text{TCNQ}^-$ transferidas a 30 mN/m a 9000 aumentos

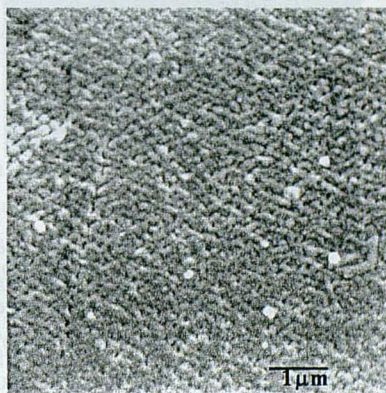


FIGURA 31: Fotografía de 20 capas de $\text{DPOP}^+\text{TCNQ}^-$ transferidas a 20 mN/m a 9000 aumentos



FIGURA 32: Fotografía de una película colapsada a 110 aumentos

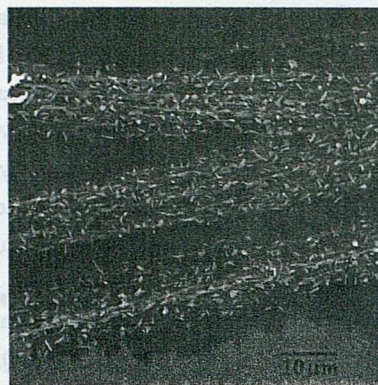


FIGURA 33: idem figura 32 a 500 aumentos



FIGURA 34: idem figura 32 a 2200 aumentos

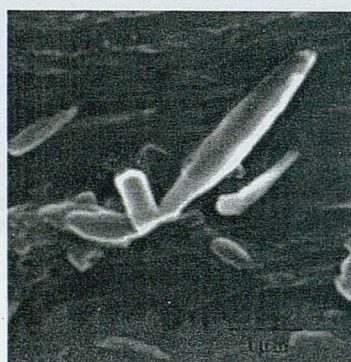


FIGURA 35: idem figura 32 a 11000 aumentos

Las películas LB han sido también estudiadas mediante espectroscopía IR que muestra la existencia de una banda correspondiente al $\text{TCNQ}^{\cdot-}$ y otra de mucha menor intensidad correspondiente al TCNQ^0 . Las películas fueron dopadas con iodo obteniéndose un estado de valencia mixta y la aparición de una banda de transferencia de carga (ver figura 36). Estas películas presentan por lo tanto un comportamiento como semiconductores orgánicos por lo que podrían ser utilizadas en dispositivos electrónicos.

Se han preparado disoluciones de LiTCNQ , que se han empleado como solución acuosa y sobre estas se ha dispersado DPPQ/Br . Según nuestro conocimiento sobre el tema esta es la primera vez que se intenta preparar una película LB con TCNQ incorporándolo directamente de la solución acuosa en lugar de dispersarlo sobre la

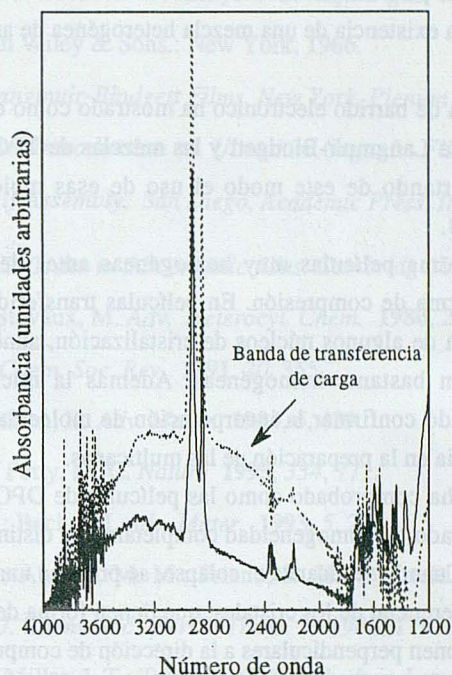


FIGURA 36: Espectro IR de una película de $\text{DPOP}^+\text{TCNQ}^-$ de 25 capas (—) sin dopar. (.....) 24 horas después del dopaje con yodo.

Conclusiones

En este trabajo se han estudiado diversas moléculas orgánicas que pueden tener importantes aplicaciones prácticas. Para potenciar sus propiedades deben organizadas en sólidos bidimensionales formando edificios moleculares perfectamente ordenados, para lo cual se ha empleado la técnica de Langmuir-Blodgett.

Se han preparado las monocapas de estas sustancias sobre la superficie acuosa, y se han transferido sobre sustratos sólidos en las mejores condiciones experimentales encontradas para ello.

Si bien es necesaria una caracterización de dichas películas mediante muchas y variadas técnicas para lograr un conocimiento exhaustivo de la disposición molecular en las mismas, en este trabajo hemos querido plasmar los resultados obtenidos con la microscopía de barrido electrónico para mostrar la bondad de esta técnica en la determinación de determinados aspectos estructurales en los que otros procedimientos de caracterización se han mostrado insuficientes.

Un nuevo método de separación de espermatozoides del plasma seminal.

Obtención de espermatozoides ovinos de alta motilidad, viabilidad y heterogeneidad superficial

M^a Teresa Muño-Blanco y José A. Cebrián-Pérez

Depto. de Bioquímica y Biología Molecular y Celular.

Facultad de Veterinaria. Universidad de Zaragoza.

Premio de la Academia a la investigación (1998-99)

Resumen

Reducir el volumen de un eyaculado o separar los espermatozoides del plasma seminal es con frecuencia necesario en el trabajo experimental y en la práctica de la inseminación artificial. La muestra final debe de tener no sólo alta concentración sino también alta motilidad y viabilidad espermática. Aunque la centrifugación es un método frecuentemente utilizado para la separación del plasma seminal, resulta nociva para espermatozoides ovinos dado que produce daños en la membrana celular que reducen la motilidad y la viabilidad celular.

El objetivo de este trabajo ha sido la puesta a punto de un nuevo método, sin centrifugación, para la separación del plasma seminal que al mismo tiempo permita obtener una población enriquecida en espermatozoides altamente móviles y viables. Los resultados obtenidos indican que la aplicación de este método de "swim-up"/dextrano a muestras de semen ovino de la raza Rasa aragonesa permite la obtención de poblaciones espermáticas altamente enriquecidas en células viables, incrementando la motilidad e integridad de membrana inicialmente presentes en una muestra de calidad media y baja. Por ello, y dada la dependencia estacional de la calidad seminal en moruecos, esta técnica permitiría una clara mejora de las dosis de inseminación artificial en períodos de calidad baja. Si el incremento de la calidad "in vitro" se traduce en un aumento de la fertilidad, la aplicación de este método en períodos correspondientes a calidad baja incrementaría la productividad. Así mismo, este método permitiría el uso de eyaculados que, aún teniendo un alto valor genético, serían normalmente descartados debido a su baja motilidad inicial, lo que supone un gran avance científico y tecnológico para la inseminación artificial en programas de biotecnología y mejora ganadera.

Abstract

In experimental work and in the application of artificial insemination it is often necessary to reduce the volume of an ejaculate or to remove the seminal plasma entirely in order to ensure a high sperm concentration and highly motile spermatozoa. Although washing of sperm cells by centrifugation is a procedure in widespread use, there have been indications that centrifugation may be harmful to the cells.

The objective of this study was to develop a modified swim-up technique, without centrifugation, to get a selection of highly motile and viable ram spermatozoa free of seminal plasma. Our results indicate that, by means of this swim-up method, many ram semen samples which would normally be discarded due to their low initial motility, can yield a spermatozoa population not only with very high motility but also with high membrane integrity and surface heterogeneity. Since the well-known influence of photoperiod on the semen quality, the application of this method during periods of low quality would allow to significantly improve the quality of the ejaculates, allowing its use further in artificial insemination. If the increase of "in vitro" semen quality accounts for higher fertility rates, this method would increase the productivity and, at the same time, allow the use of some ejaculates with high genetic value which would normally be discarded due to their low quality. Its application would lead to important scientific and technological beneficial in biotechnology and livestock improvement program.

Introducción

La inseminación artificial (IA) usada en combinación con esquemas rigurosos de testaje de la descendencia puede aumentar considerablemente la mejora genética (Eppleston y Maxwell, 1993). Sin embargo, la IA en ganado ovino no es un método ampliamente extendido, posiblemente debido a la baja fertilidad obtenida en inseminación cervical tanto con semen fresco como congelado.

La presencia de plasma seminal y otros elementos del eyaculado como células muertas y dañadas resultan nocivos para los espermatozoides reduciendo así la fertilidad (Lindemann y col., 1982; Saacke y col., 1994; Shanon y Curson, 1972). Por ello, en el trabajo experimental y en la práctica de la inseminación artificial es con frecuencia necesario separar los espermatozoides del plasma seminal o reducir el volumen de un eyaculado para conseguir una concentración espermática adecuada. Muchos métodos de separación de espermatozoides de mamíferos se basan en técnicas de centrifugación. Aunque la sensibilidad de los espermatozoides a la centrifugación varía mucho con la especie, se han descrito efectos nocivos de la centrifugación sobre espermatozoides de ovino (Gavella, 1983; Graham, 1994) y humano (Aitken y Clarkson, 1988;

Mortimer, 1991). Además, estos procedimientos no incorporan ningún elemento de selección de la calidad espermática.

Los espermatozoides tienen tendencia innata de migrar a un medio depositado sobre la muestra de semen. Este hecho es la base de la técnica de "swim-up" que permite separar poblaciones de espermatozoides con diferente motilidad (Berger y col., 1985; Lopata y col., 1976; Vazquez y col., 1988). Dado que el método clásico de "swim-up" utiliza centrifugación la cual reduce la motilidad de los espermatozoides, se ha puesto a punto un método para la separación de espermatozoides humanos sin centrifugación (Alvarez y col., 1993). Sin embargo, cuando aplicamos este método a semen ovino no conseguimos recuperar espermatozoides con alta viabilidad y la mayoría de las células presentaban el flagelo enroscado como si el medio fuera hipoosmótico (Jeyendran y col., 1992). Además, esta pérdida de viabilidad también podría deberse a la alta dilución de las células durante el proceso, ya que se ha descrito que los espermatozoides libres de plasma seminal son muy sensibles a la alta dilución en un medio salino simple (Ashworth y col., 1994).

Aunque la motilidad es uno de los parámetros más importantes para decisiones que afectan al posterior procesamiento del semen, no es la única característica de interés en el control de la calidad seminal. Algunos resultados han demostrado que espermatozoides con buena motilidad tienen daños en su membrana (Valcárcel y col., 1994). La viabilidad celular (integridad y funcionalidad de la membrana plasmática) es necesaria para el correcto metabolismo celular (Januskauskas y Rodriguez-Martinez, 1995; Rodriguez-Martinez y col., 1997), y es mejor indicador de la capacidad fertilizante que la motilidad en semen humano (Zaneveld y col., 1990), bovino (Correa y Zavos, 1994) y ovino (Vazquez y col., 1988). Así mismo, la heterogeneidad espermática de un eyaculado, es decir, la variabilidad funcional de los espermatozoides, es una característica inherente a las células espermáticas (Ollero y col., 1994; Watson, 1995) que se plantea como una estrategia evolutiva para maximizar la probabilidad de que la activación espermática se produzca en las inmediaciones del ovocito (Amann y col., 1993). Es decir, cada espermatozoide o grupo de espermatozoides alcanza la capacitación en un momento diferente, asegurando así el éxito de la fecundación. Por tanto, al diseñar procedimientos de selección de espermatozoides se debe tener en cuenta todos estos parámetros, no únicamente la motilidad.

Dado que las características funcionales de las células espermáticas se deben reflejar en diferencias en sus propiedades superficiales (Harrison, 1977), y que la heterogeneidad espermática se manifiesta, entre otras características, en la diferente composición y estructura de la superficie celular, el reparto en sistemas bifásicos acuosos es una técnica de gran utilidad para el estudio de las características de los

espermatozoides. Esta técnica se basa en la diferente afinidad superficial de las células por soluciones acuosas de polímeros como dextrano y polietilenglicol (PEG) (Albertsson, 1986; Fisher y Sutherland (eds), 1989). En un sistema bifásico constituido por dichos polímeros las células reparten preferentemente en la fase inferior (rica en dextrano) o en la fase superior (rica en PEG), según sus características superficiales. La resolución puede aumentarse realizando experimentos de múltiple reparto o distribución en contracorriente (CCD) que combinados con la centrifugación acelera la separación de las fases y permite reducir muchísimo la duración del proceso (CCCD).

Nuestro grupo de investigación ha confirmado que la CCCD en sistemas acuosos de bifase es una técnica capaz de revelar la heterogeneidad espermática asociada a diferentes estados de viabilidad celular. La pérdida de viabilidad conlleva una disminución de la hidrofobicidad celular (Ollero y col., 1996b; Ollero y col., 1994; Pascual y col., 1993). Los espermatozoides no viables presentan mayor afinidad por la fase inferior rica en dextrano, es decir, se localizan preferentemente a la izquierda del diagrama de CCCD. Así mismo, hemos comprobado recientemente que la pérdida de viabilidad de espermatozoides ovinos asociada al proceso de congelación se refleja en una disminución de la heterogeneidad superficial (Ollero y col., 1997).

El objetivo de este trabajo ha sido la puesta a punto de un nuevo método, sin centrifugación, para la separación del plasma seminal que al mismo tiempo permita obtener una población enriquecida en espermatozoides altamente móviles, viables y conservando una alta heterogeneidad superficial.

Material y Métodos

Medios y Reactivos

Se modificó el medio del fluido tubular humano (mHTF) descrito por Quinn et al. (Quinn y col., 1985) para conseguir la viscosidad y osmolaridad necesarias. Se sustituyó la mayor parte de ClNa y ClK por sacarosa resultando las siguientes concentraciones finales: 50 mM NaCl, 10 mM KCl y 0,2M sucrose, pH 6,5. La osmolaridad se determinó en un osmómetro de presión de vapor ($\pi = 350$ mOsm). La solución de dextrano contenía 30 mg/ml de dextrano (250,000 aver.mol.wt.; Sigma Chemical Co, St. Louis, MO, USA) en el mHTF modificado.

Recogida de semen

Los experimentos se realizaron con semen ovino fresco procedente de 3 moruecos de raza Rasa aragonesa de 2,5 a 3 años de edad, recogido con vagina artificial. Los sementales se mantuvieron en el Servicio de

Experimentación Animal de la Facultad de Veterinaria de Zaragoza, en condiciones uniformes de nutrición y aislados entre sí. El estudio se realizó en un período de 14 meses, de Septiembre a Noviembre. Se utilizó una mezcla del segundo eyaculado de los 3 moruecos, con objeto de eliminar diferencias individuales (Ollero y col., 1996a).

Evaluación de las muestras de semen

Las muestras de semen se evaluaron antes y después de su procesamiento determinando la cocentración espermática, motilidad, respuesta al choque hipotónico (HOS-test) y viabilidad. La concentración espermática se determinó por recuento en cámara de Neubauer. La motilidad individual progresiva diluyendo el semen 4-5 veces en diluyente de citrato-fructosa, mediante estimación visual con un sistema de microscopio de contraste de fases mantenido a 37°C acoplado a una pantalla de televisión. El porcentaje de espermatozoides móviles se estimó en incrementos de 5-10%. Se definieron tres categorías (< 60%, 60 a 75%, >75%) para agrupar los datos de acuerdo con los cambios de la calidad seminal a lo largo del año.

El test de resistencia hipoosmótico (HOS) se usó para evaluar la actividad funcional de la membrana plasmática según el procedimiento descrito por Jeyendran y colaboradores (Jeyendran y col., 1992), y adaptado para semen ovino por García Artiga (García Artiga, 1994).

La viabilidad celular (integridad de la membrana) se valoró mediante la doble tinción de fluorescencia con diacetato de carboxi-fluoresceína y yoduro de propidio (Harrison y Vickers, 1990). Se contaron, como mínimo, 200 células en duplicado para cada muestra.

Los resultados obtenidos se expresan como valores medios \pm SD del número de muestras indicadas en cada caso. El test ANOVA se aplicó para determinar diferencias significativas entre las muestras de semen antes y después del "swim-up".

Realización del "swim-up"

El esquema general se presenta en la Fig. 1. Se realizó un proceso de cuatro etapas. Se depositaron alícuotas de 0,5 ml de semen fresco en el fondo de tubos redondeados de 15 mm de diámetro, sobre los que se añadió 0,5 ml de la disolución de dextrano (30 mg/ml) y sobre ella 1,5 ml de la solución modificada mHTF conteniendo 5 mg/ml de BSA (mHTFA). Los tubos se mantuvieron a 37°C durante 15 minutos transcurridos los cuales se recogieron cuidadosamente 0,75 ml de la capa superior conteniendo las células. Se añadieron cuidadosamente 0,75 ml de medio nuevo. La secuencia de incubación se repitió 3 veces obteniendo así 4 sobrenadantes. El primero se descartó ya que contenía restos de plasma

seminal. Los 3 sobrenadantes obtenidos de los 3 últimos pasos se mezclaron, resultando 2,25 ml con $1,84 \pm 0,02 \times 10^9$ espermatozoides (50% recuperación).

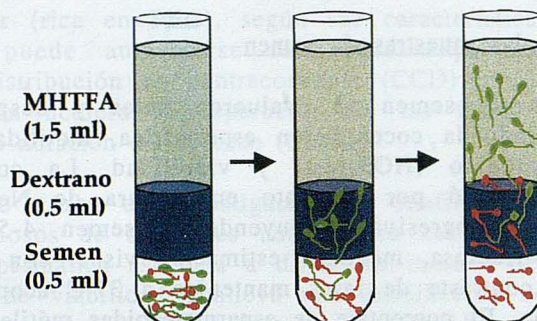


Fig. 1.- Separación de espermatozoides ovinos mediante "swim-up"/dextrano.

La cantidad de plasma seminal remanente en la muestra final se estimó determinando dos componentes de plasma seminal, ácido cítrico y β -N-acetilglucosaminidasa (NAG) en la muestra inicial, en los 4 sobrenadantes y en la muestra final de "swim-up". El contenido en ácido cítrico se analizó con un kit comercial (Mannheim Boehringer, Germany, Cat. N° 139 076) (Gavella, 1983). β -N-acetylglucosaminidase (NAG) se determinó como se describe previamente (Maruhn, 1976).

Análisis mediante CCCD

Las experiencias de distribución en contracorriente con centrifugación ("centrifugal counter-current distribution" o CCCD) se realizaron en una unidad construida en nuestro laboratorio en colaboración con el Departamento de Tecnología Mecánica de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales y el Servicio de Instrumentación Científica de la Universidad de Zaragoza, tomando como modelo la unidad creada por Akerlund (Akerlund, 1984) quien incorporó al método convencional un campo centrífugo con el fin de reducir el tiempo de separación. El aparato consiste en un rotor constituido por dos platos concéntricos en los que se disponen circularmente 60 cavidades, quedando dividida cada una en parte superior e inferior, correspondiendo al plato interior y exterior respectivamente. El plato interior es móvil con respecto al exterior, de modo que al girar el primero sobre el segundo se produce una transferencia de las fases superiores sobre las correspondientes fases inferiores.

La unidad realiza de forma automática ciclos constituidos por tres pasos: agitación, centrifugación y transferencia. Al estar situados los

platos horizontalmente, el plano de las transferencias es vertical. Estas se realizan durante los últimos segundos de la centrifugación. La fuerza centrífuga empleada fue de 1000 x g. El proceso se controla por una unidad computerizada construida en el Servicio de Instrumentación Científica de la Universidad de Zaragoza que permite seleccionar el tiempo de agitado, de centrifugación, el número de grados de circunferencia que debe girar el plato interior en la transferencia y el número de ciclos a realizar.

El sistema bifásico utilizado estaba formado por dextrano T500 5,5% (w/w), PEG 6000 2% (w/w), Ficoll 400 10,5% (w/w), sacarosa 0,25 M, EGTA 0,1 mM, fosfato sódico 4 mM pH 7,5, 10% (v/v) de solución Hepes 10x (glucosa 50 mM, Hepes 100 mM, KOH 20 mM). En cada experimento se calculó la relación de volumen mediante muestras de 5 gramos del sistema. El volumen de sistema cargado en todas las cámaras fue la cantidad necesaria para mantener el volumen necesario de la fase inferior (0,7 ml).

El medio del "swim-up" se eliminó diluyendo dos veces con 5 volúmenes del medio de bifase y mediante filtración a través de filtros Millipore de 5- μ m de tamaño de poro. Las muestras con 1×10^8 células se cargaron en las cámaras 0 y 30, y se realizaron 29 transferencias, que conlleva la ventaja de poder analizar dos muestras simultáneamente y en idénticas condiciones. El tiempo de agitación y centrifugación fue de 60 segundos. Al terminar el proceso, se diluyó el contenido de las cámaras añadiendo el mismo volumen de medio de bifase. Se recogieron las fracciones y se realizó el recuento celular y la determinación de la viabilidad.

Los resultados se expresan como el porcentaje de células en cada cámara con respecto al valor obtenido en la cámara que contiene el n° máximo de células. Como consecuencia del proceso de separación, las células con mayor afinidad por la fase inferior rica en dextrano (principalmente debido a menor hidrofobicidad) se concentrarán en las primeras cámaras, es decir, a la izquierda del diagrama. Las células que reparten por igual entre ambas fases se distribuyen en la parte central, y las que tienen más afinidad por la fase superior rica en PEG (principalmente debido a mayor hidrofobicidad) aparecerán a la derecha del diagrama.

Resultados

Dado que la calidad inicial del semen ovino varía con la estación del año, las muestras se clasificaron de acuerdo con 3 categorías de motilidad individual progresiva: menor de 60%, entre 60 y 75%, y más de 75%.

La contaminación de plasma seminal en la muestra obtenida realizando el proceso de "swim-up" fue muy baja ya que se encontró un 2% de citrato y un 5% de actividad de NAG. El primer sobrenadante obtenido se descartó dado que contenía un 13% de citrato y un 17% de actividad de NAG.

La calidad inicial del semen aumentó tras el proceso de "swim-up" ya que el porcentaje de motilidad, respuesta al HOS-test y viabilidad fue significativamente mayor en la muestra final de "swim-up", para cualquiera de las tres categorías definidas. La fig.2 muestra los porcentajes de incremento de estos parámetros en muestras de diferente calidad inicial. A partir de las muestras con motilidad inicial menor del 60% se consiguió un aumento del 52% en motilidad individual progresiva, 31% en respuesta al HOS y 54% en viabilidad. Se recuperaron $1,4 \pm 0,02 \times 10^9$ espermatozoides, con 74,7% de motilidad, 63% HOS+ y 64% viabilidad (Tabla 1).



Figura 2.- Porcentaje de incremento de motilidad (■), viabilidad (▨) y respuesta al HOS-test (▤) después del "swim-up" en muestras de calidad inicial baja (a, n=13), media (b, n=12) y alta (c, n = 10). Las diferencias a vs b, a vs c, b vs c son significativas ($P < 0,01$).

Para las muestras de semen de calidad intermedia (motilidad entre 60 y 75%) los resultados obtenidos se reflejan en la Tabla 2. Aunque los porcentajes de incremento de motilidad, respuesta al HOS y viabilidad fueron menores que para las muestras de calidad inicial baja (Figura 2), los valores medios de la muestra final fueron muy altos (80% motilidad, 70% HOS+ y 72% viabilidad). La recuperación celular fue 70% ($1,8 \pm 0,24 \times 10^9$ células).

Tabla 1.- Porcentajes de motilidad (M), viabilidad (V) y respuesta al HOS (H) en la muestra inicial, en los 4 sobrenadantes del proceso de "swim-up", y en la muestra final del "swim-up" obtenida a partir de muestras de semen de calidad baja (n = 13).

	Inicial		Sobrenadantes				Final
		1	2	3	4	2+3+4	
M	53,27 ± 0,53	54,80 ± 2,53	68,30 ± 2,55 ^d	74,50 ± 2,41 ^c	71,30 ± 2,74 ^d	74,78 ± 0,99 ^a	
V	39,34 ± 0,86	53,79 ± 1,59 ^d	59,09 ± 1,59 ^d	74,14 ± 0,70 ^a	72,80 ± 0,75 ^a	64,20 ± 0,62 ^a	
H	43,03 ± 1,78	65,33 ± 4,27 ^e	65,33 ± 4,87 ^e	66,33 ± 1,49 ^d	64,33 ± 0,68 ^b	63,20 ± 1,64 ^b	

Diferentes superíndices en filas indican diferencias significativas. a: P < 0,001; b: P < 0,005; c: P < 0,01; d: P < 0,05; e, f: P < 0,1.0

Tabla 2. Porcentajes de motilidad (M), viabilidad (V) y respuesta al HOS (H) en la muestra inicial, en los 4 sobrenadantes del proceso de "swim-up", y en la muestra final del "swim-up" obtenida a partir de muestras de semen de calidad media (n=12).

	Inicial		Sobrenadantes				Final
		1	2	3	4	2+3+4	
M	68,43 ± 0,27	63,25 ± 0,37 ^d	68,25 ± 0,37 ^f	78,25 ± 0,37 ^b	74,25 ± 0,87 ^d	79,92 ± 0,84 ^b	
V	59,35 ± 0,30	60,75 ± 0,90 ^e	67,42 ± 1,60 ^d	73,62 ± 1,20 ^a	68,37 ± 1,32 ^b	72,00 ± 0,57 ^a	
H	66,67 ± 0,00	74,50 ± 0,06 ^a	73,40 ± 0,00 ^a	71,33 ± 0,12 ^a	70,30 ± 0,11 ^a	70,97 ± 0,17 ^a	

Diferentes superíndices en filas indican diferencias significativas. a: P < 0,001; b: P < 0,005; c: P < 0,01; d: P < 0,05; e, f: P < 0,1.

Los valores medios obtenidos para los 3 parámetros de calidad seminal, antes y después del proceso de "swim-up" con muestras seminales de motilidad individual progresiva mayor del 75% se reflejan en la Tabla 3. La recuperación celular fue 69% ($2,3 \pm 0,06 \times 10^9$ espermatozoides), siendo aproximadamente un 84% los valores de los tres parámetros.

Tabla 3. Porcentajes de motilidad (M), viabilidad (V) y respuesta al HOS (H) en la muestra inicial, en los 4 sobrenadantes del proceso de "swim-up", y en la muestra final

del "swim-up" obtenida a partir de muestras de semen de calidad alta (n=10).

	Inicial	Post-swim-up fractions				Pooled
		1	2	3	4	2+3+4
M	79,42 ± 0,30	70,30 ± 0,16 ^d	74,67 ± 0,69 ^e	86,33 ± 0,55 ^b	83,67 ± 0,16 ^e	84,50 ± 0,25 ^a
V	75,67 ± 0,66	76,00 ± 2,23 ^f	78,00 ± 2,23 ^f	87,33 ± 2,18 ^d	83,00 ± 1,78 ^d	82,83 ± 0,80 ^d
H	79,00 ± 3,00	81,00 ± 3,50 ^f	81,00 ± 4,00 ^f	88,50 ± 5,75 ^f	83,50 ± 4,75 ^f	85,50 ± 5,25 ^f

Diferentes superíndices en filas indican diferencias significativas. a: P < 0,001; b: P < 0,005; c: P < 0,01; d: P < 0,05; e, f: P < 0,1.

Análisis por CCCD en un sistema acuoso de bifase de las características superficiales de los espermatozoides de la muestra obtenida por "swim-up" revelan una gran heterogeneidad superficial así como una alta viabilidad tras el proceso de CCCD (Fig. 3). El perfil de distribución presentado en esta figura es representativo de tres experimentos diferentes para una muestra de viabilidad inicial sobre 50% que aumentó a 72% tras el proceso de "swim-up". Se observa un pico principal, correspondiente a la subpoblación mayoritaria, en el centro-derecha del diagrama, donde se localizan preferentemente las células viables, y otros picos menores más a la izquierda del perfil. No se observa ningún pico enriquecido en células no viables.

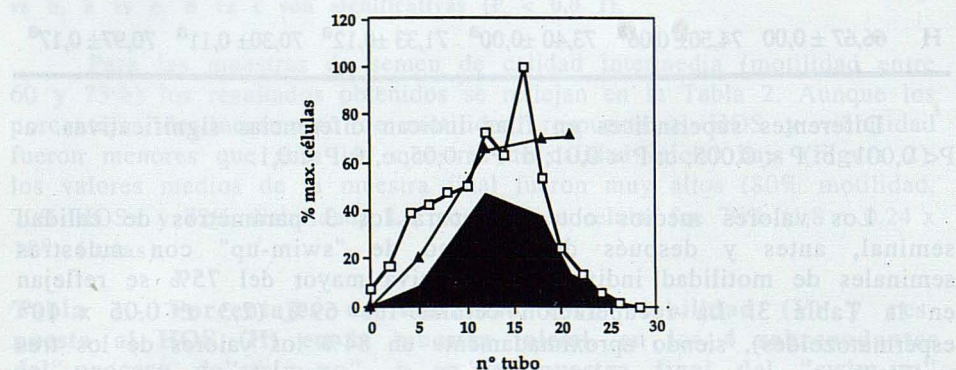


Figura 3.- Perfil de CCCD de una muestra de semen ovino seleccionada por "swim-up". (□) % de células en cada cámara respecto al máximo, (▲) % de células viables en cada cámara, ■ distribución de las células viables totales.

Discusión

La mayoría de los métodos de selección de espermatozoides aumentan la proporción de espermatozoides móviles y reducen, aunque no pueden eliminar, la proporción de espermatozoides dañados. El éxito de un método preparativo de esperma suele medirse por su rendimiento en células móviles. Sin embargo, resultados de diferentes estudios sugieren que la valoración de la integridad y funcionalidad de la membrana espermática puede predecir la fertilidad con más exactitud que la motilidad (Check y Check, 1991; Check y col., 1991; Valcárcel y col., 1994). Así mismo, en los últimos años, la heterogeneidad de la población espermática está siendo considerada una característica de gran interés para la función espermática (Amann y col., 1993; Ollero y col., 1994; Watson, 1995). Por tanto, los protocolos de selección de espermatozoides deben de estar dirigidos a mejorar tanto la calidad de la membrana como la heterogeneidad espermática. Así mismo, y dado que la centrifugación es nociva para espermatozoides ovinos (Aitken y Clarkson, 1988; Graham, 1994; Mortimer, 1994) estas técnicas deberían evitar el uso de la centrifugación. El método de "swim-up"/dextrano descrito en este trabajo tiene como objetivo eliminar el plasma seminal del semen sin centrifugación separando, al mismo tiempo, una subpoblación de espermatozoides con alta motilidad, viabilidad y heterogeneidad.

Aplicando a semen ovino el método de "swim-up" descrito por Alvarez et al. para semen humano (Alvarez y col., 1993) la recuperación de espermatozoides viables resultó muy baja. Este hecho podría ser debido a la osmolaridad del medio empleado (280 mOsm/Kg) ya que los espermatozoides presentaban el flagelo enrollado, o también al efecto nocivo de la alta dilución en un medio salino simple sobre los espermatozoides de ovino libres de plasma, como se ha descrito anteriormente (Ashworth y col., 1994). Nosotros sustituimos la mayor parte de C1Na y C1K del mHTF por sacarosa aumentando así la osmolaridad del medio hasta 350 mOsm/Kg, y al mismo tiempo, la densidad y viscosidad del medio depositado sobre los espermatozoides. Sólo los espermatozoides más móviles, capaces de atravesar ese medio, podrán ser recogidos en la parte superior del sobrenadante. Combinando los tres últimos sobrenadantes (2, 3 y 4) se obtiene una población de espermatozoides de alta calidad que, además, no tiene plasma seminal, el cual resulta nocivo para la supervivencia espermática (Doot y col., 1979; Schmehl y col., 1986).

Los resultados obtenidos con muestras de motilidad individual baja indican que el empleo de este método de selección permite mejorar sustancialmente la calidad de la muestra. La motilidad de la muestra final es semejante a la obtenida para espermatozoides humanos (Bongso y col., 1989), pero además, el uso del HOS-test y de la doble tinción de

fluorescencia permite una valoración directa de la funcionalidad e integridad de membrana (viabilidad) de cada espermatozoide de la población, mientras que los trabajos anteriores se basaban únicamente en la estimación visual de la motilidad. Es de gran importancia resaltar que la aplicación de este método de "swim-up"/dextrano a muestras de semen ovino que serían normalmente descartadas debido a su baja motilidad inicial, permite seleccionar una población espermática no sólo con alta motilidad sino también con alta integridad y funcionalidad de membrana.

En el caso de muestras con motilidad inicial media o alta, aunque la mejora relativa de los parámetros estudiados no es tan alta como en muestras con motilidad baja, los valores finales obtenidos son muy altos (72 y 82% viabilidad, respectivamente), lo que indica que esta técnica es adecuada para la separación de una población espermática de alta calidad.

El porcentaje medio de células móviles recuperadas en la muestra final, para todas las muestras de semen analizadas, fue $75,3 \pm 1,6$, ligeramente superior al descrito por Alvarez et al. para semen humano por el método de "swim-up/dextrano" (Alvarez y col., 1993), y muy superior al conseguido con el método clásico de "swim-up" y el de gradiente de Percoll. El valor obtenido en este trabajo es suficientemente alto para sugerir que las células seleccionadas corresponden a la mayoría de las células móviles de la muestra, más a que a un pequeño conjunto de la población, obteniendo al mismo tiempo una población enriquecida en espermatozoides altamente viables.

Los espermatozoides de un ejaculado constituyen una población muy heterogénea, como han puesto de manifiesto estudios de CCCD (Ollero y col., 1994). La pérdida de esta heterogeneidad es un efecto bien conocido del proceso de congelación (Ollero y col., 1997; Ollero y col., 1996b; Watson, 1995), que reduce drásticamente la capacidad fertilizante del semen. En este trabajo, el análisis por CCCD de las características superficiales de los espermatozoides de la muestra obtenida por "swim-up" revela una gran heterogeneidad superficial así como una alta viabilidad celular. Estos resultados indican que la población seleccionada por el método de "swim-up"/dextrano tiene, no sólo una gran viabilidad y heterogeneidad en el momento de su obtención, sino también una gran capacidad de resistencia ya que conserva una alta integridad de membrana incluso después del proceso de distribución en contracorriente con centrifugación.

Los resultados de este estudio constituyen un importante aliciente para la mejora de los métodos de selección de espermatozoides de alta calidad. Si el incremento de la calidad "in vitro" se traduce en un aumento de la fertilidad, la aplicación de este método a muestras de calidad baja

incrementaría la productividad. Así mismo, permitiría el uso de eyaculados que, aún teniendo un alto valor genético, serían normalmente descartados debido a su baja motilidad inicial, lo que supone un gran avance científico y tecnológico para la inseminación artificial en programas de mejora ganadera.

Bibliografía

- Aitken, R. J. and Clarkson, J.S. (1988): Significance of reactive oxygen species and antioxidants in defining the efficacy of sperm preparation techniques. *J. Androl.* **9**, 267-376.
- Akerlund, H. E. (1984): An apparatus for counter-current distribution in a centrifugal acceleration field. *J. Biochem. Biophys. Methods.* **9**, 133-141.
- Albertsson, P. A. (1986). Partition of Cell Particles and Macromolecules. 3rd edition. New York: John Wiley and Sons.
- Alvarez, J.G., Lasso, J.L., Blasco, L., Nuñez, R.C., Heyner, S., Caballero, P.P. and Storey, B.T. (1993): Centrifugation of human spermatozoa induces sublethal damage; separation of human spermatozoa from seminal plasma by a dextran swim-up procedure without centrifugation extends their motile lifetime. *Human Reprod.* **8**, 1087-1092.
- Amann, R.P., Hammerstedt, R.H. and Veeramachaneni, D.N.R. (1993). The Epididymis and Sperm Maturation - A Perspective. *Reprod. Fert. Dev.* **5**, 361-381.
- Ashworth, P. J. C., Harrison, R.A.P., Miller, N.G.A., Plummer, J.M. and Watson, P. F. (1994): Survival of ram spermatozoa at high dilution: Protective effect of simple constituents of culture media as compared with seminal plasma. *Reprod. Fertil. Dev.* **6**, 173-180.
- Berger, T., Marrs, R.P. and Moyer, D.L. (1985). Comparison of techniques for selection of motile spermatozoa. *Fertil. Steril.* **43**, 268-273.
- Bongso, T.A., Ng, S.C. and Mok, H. (1989): Effect of sperm motility on in vitro fertilization. *Arch. Androl.* **22**, 185-190.
- Check, M.L. and Check, J.H. (1991): Poor hypo-osmotic swelling test results from cryopreserved sperm despite preservation of sperm motility. *Arch. Androl.* **26**, 37-41.

- Check, M.L., Check, J.H. and Long, R. (1991): Detrimental effects of cryopreservation on the structural and functional integrity of the sperm membrane. *Arch. Androl.* **27**, 155-160.
- Correa, J.R. and Zavos, P.M. (1994): The hypoosmotic swelling test: its employment as an assay to evaluate the functional integrity of the frozen-thawed bovine sperm membrane. *Theriogenology*. **42**, 351-360.
- Doot, H.M., Harrison, R.A.P. and Foster, G.C.A. (1979): The maintenance of motility and the surface properties of epididymal spermatozoa from bull, rabbit and ram in homologous seminal and epididymal plasma. *J. Reprod. Fertil.* **62**, 193-197.
- Eppleston, J. and Maxwell, W.M.C. (1993): Recent attempts to improve the fertility of frozen ram semen inseminated into the cervix. *Wool Tech. Sheep Breed.* **41**, 291-302.
- Fisher, D. and Sutherland, A. (1989). Separation using aqueous phase systems. New York: Plenum Press.
- García Artiga, C: Test de endósmosis en ovino. 7th Internatl. Mtg. Anim. Reprod. AI. (1994). 77-81. Spaingraf. S.L., Murcia. Spain.
- Gavella, M. (1983): A simple automated method for determination of citric acid levels in semen. *Int. J. Androl.* **6**, 585-591.
- Graham, J.K. (1994): Effect of seminal plasma on the motility of epididymal and ejaculated spermatozoa of the ram and bull during the cryopreservation process. *Theriogenology*. **41**, 1151-1162.
- Harrison, R.A.P. (1977): The metabolism of mammalian spermatozoa. In *Frontiers in Reproduction and Fertility Control* (R. O. Greep and M. A. Koblinsky eds.) pp.379-401. Cambridge: Mass: MIT Press.
- Harrison, R.A.P. and Vickers, S.E. (1990): Use of fluorescent probes to assess membrane integrity in mammalian spermatozoa. *J. Reprod. Fert.* **88**, 343-352.
- Januskauskas, A. and Rodriguez-Martinez, H. (1995): Assessment of sperm viability by measurement of ATP, membrane integrity and motility in frozen/thawed bull semen. *Acta Vet. Scand.* **36**, 571-574.
- Jeyendran, R.S., Vandervan, H.H. and Zaneveld, L.J.D. (1992): The Hypoosmotic Swelling Test - An Update. *Arch. Androl.* **29**, 105-116.

- Lindemann, C.B., Fisher, M. and Lipton, M. (1982): A comparative study of the effect of freezing and frozen storage on intact demembrated bull spermatozoa. *Cryobiology*. **19**, 20-28.
- Lopata, A., Patullo, M.J., Chang, A. and James, B. (1976): A method for collecting motile spermatozoa from human semen. *Fertil. Steril.* **27**, 677-684.
- Maruhn, D. (1976): Rapid colorimetric assay of β -galactosidase and N-acetyl- β -glucosaminidase in human urine. *Clin. Chim. Acta.* **73**, 453-461.
- Mortimer, D. (1991): Sperm preparation techniques and iatrogenic failures of in-vitro fertilization. *Hum. Reprod.* **6**, 173-176.
- Mortimer, D. (1994): Sperm Recovery Techniques to maximize Fertilizing Capacity. *Reprod. Fertil. Dev.* **6**, 25-31.
- Ollero, M., Cebrián-Pérez, J.A. and Muño-Blanco, T. (1997): Improvement of cryopreserved ram sperm heterogeneity and viability by addition of seminal plasma. *J. Androl.* **18**, 732-740.
- Ollero, M., López-Pérez, M., Cebrián-Pérez, J.A. and Muño-Blanco, T. (1996a): Viability of ram spermatozoa in relation to the abstinence period and successive ejaculations. *Int. J. Androl.* **19**, 287-292.
- Ollero, M., Muño-Blanco, T., López-Pérez, M.J. and Cebrián-Pérez, J.A. (1996b): Surface changes associated with ram sperm cryopreservation revealed by counter-current distribution in an aqueous two-phase system. Effect of different cryoprotectants. *J. Chrom. B* **680**, 157-164.
- Ollero, M., Pascual, M.L., Muño-Blanco, T., Cebrián-Pérez, J.A. and M.J., López-Pérez. (1994): Surface changes associated with maturation of ram spermatozoa can be revealed by centrifugal counter-current distribution in an aqueous two-phase system. *J. Chrom.* **668**, 173-178.
- Pascual, M.L., Muño-Blanco, T., Cebrián-Pérez, J.A. and López-Pérez, M.J. (1993): Sperm cell heterogeneity revealed by centrifugal counter current distribution in an aqueous two-phase system. *J. Chrom.* **617**, 51-57.
- Quin, P., Kerin, J.F. and Warners, G.M. (1985): Improved pregnancy rate in human in vitro fertilization with the use of a medium based on the composition of human tubal fluid. *Fertil. Steril.* **44**, 493-498.

- Rodriguez-Martinez, H., Larsson, B. and Pertoft, H. (1997): Evaluation of sperm damage and techniques for sperm clean-up. *Reprod. Fertil. Dev.* **9**, 297-308.
- Saacke, R.G., Nadir, S. and Nebel, R.L. (1994). Relationship of semen quality to sperm transport, fertilization, and embryo quality in ruminants. *Theriogenology*. **41**, 45-50.
- Schmehl, M.K., Anderson, S.P., Vazquez, I.A. and Graham, E.F. (1986): The effect of dialysis of extended ram semen prior to freezing on post-thaw survival and fertility. *Cryobiology*. **23**, 406-414.
- Shanon, P. and Curson, B. (1972): Toxic effect and action of dead sperm on diluted bovine semen. *J. Dairy Sci.* **55**; 615-620.
- Valcárcel, A., de las Heras, M.A., Pérez, L., Moses, D.F. and Baldassarre, H. (1994): Fluorescent staining as a method of assessing membrane damage and post-thaw survival of ram spermatozoa. *Theriogenology*. **41**, 483-489.
- Vazquez, I., Graham, E.F., Martinez, F., Alcaide, M. and Soriano, I.: Fertility with frozen ram semen in Manchego sheep. 11 Con. Anim. Reprod. A. I. (1988). **3**, 305-306. Dublin.
- Watson, P.F. (1995): Recent developments and concepts in the cryopreservation of spermatozoa and the assessment of their post-thawing function. *Reprod. Fert. Dev.* **7**, 871-891.
- Zaneveld, L.J.D., Jeyendran, R.S., Krajesky, P., Coetzee, K., Kruger, T.F. and Lombard, L.J. (1990) Hypoosmotic swelling test. In Human spermatozoa in assisted reproduction (Acosta, A. Swanson, R.J., Ackerman, S.B., Kruger, T.F., Van Zyl, J.A., Menkveld, R. eds.) pp.223-227. Baltimore: Williams and Wilkins.

Factores que afectan el aislamiento y cultivo de protoplastos de *Prunus armeniaca*

Ana Algarate y Pilar Andreu

Dpto. de Pomología de la Est. Experimental de Aula Dei.

Premio de la Academia a la investigación (1998-99)

INTRODUCCION

La mejora de frutales persigue distintos objetivos, algunos dirigidos a la obtención de patrones en los que se busca una alta compatibilidad de injerto, buen anclaje, carencia de espinas en la zona del injerto o de corte y recalce, tolerancia a distintos tipos de estrés tales como la sequía, la salinidad, la deficiencia de nutrientes, buen comportamiento frente a temperaturas extremas y otros que hacen relación a la rentabilidad del árbol, como elevada producción, duración del periodo juvenil, vigor, necesidades de frío invernal y época de floración, calibre, color y sabor del fruto, época de maduración, máxima eficiencia fotosintética, resistencia a enfermedades y parásitos.

En el género *Prunus*, los programas convencionales de mejora genética son muy largos debido a la lenta entrada en el ciclo productivo de los árboles. Además la transmisión de genes entre especies es muy restringida dada su elevada autoesterilidad e interincompatibilidad. La utilización del cultivo *in vitro* permite acelerar los programas de mejora genética y superar los inconvenientes con que se encuentra el investigador con los métodos convencionales de mejora vegetal al poder aplicar distintas técnicas como:

-La propagación masiva y clonal de plantas selectas o plantas difíciles de propagar por medios convencionales, pudiendo disponer de un número elevado de plantas clonales que permiten establecer ensayos en campo comparativos entre distintos clones obtenidos por esta técnica.

-Los estudios de compatibilidad entre patrón y variedad *in vitro* permiten obtener resultados en cuestión de meses, mientras que realizados en campo podrían prolongarse durante varios años.

-Selección sanitaria, regeneración de plantas a partir de yemas tratadas con termoterapia o incluso aplicando la termoterapia *in-vitro* y propagación posterior por micropropagación.

-Selección *in vitro*: El cultivo *in vitro* ofrece la posibilidad de seleccionar distintos genotipos frente a diferentes factores bióticos (resistencia a enfermedades y plagas) y abióticos (resistencia a salinidad, a metales pesados, a clorosis férrica, a sequía, etc...). Esta técnica que se puede realizar en plantas enteras, en brotes, en raíces, o en diferentes tipos de tejidos, e incluso en cultivos de células aisladas, implica disponer de métodos de regeneración de plantas seleccionadas *in vitro*.

La variación somaclonal, que se puede obtener mediante la utilización de suspensiones celulares y cultivo de protoplastos (células vegetales sin pared celular), también permite seleccionar material vegetal con caracteres interesantes y presenta la ventaja de poder disponer y estudiar enormes cantidades de individuos, aumentando la probabilidad de aparición de mutaciones de interés, espontáneas o inducidas por el mejorador.

Los protoplastos son células vegetales que han sido separadas de sus paredes celulares mediante un procedimiento mecánico (fueron los primeros desarrollados) o por digestión enzimática (método mucho más fiable y usado en la actualidad). Carecen de pared pero conservan todos los orgánulos celulares y el núcleo, contenidos sólo por la membrana celular. De hecho, según la teoría de Schwann y Schleiden (1838) sobre la totipotencia de las células de las plantas superiores, es decir, la capacidad de producir un organismo altamente diferenciado a partir de una sola célula somática, cualquier protoplasto (también llamados células desnudas) tiene capacidad de regenerar una planta entera.

El primer aislamiento de protoplastos vivos fue descrito por De Klerck (1892), quién tuvo éxito al aislar protoplastos de cebolla usando métodos mecánicos. El primer aislamiento por métodos enzimáticos lo consiguió Gajda (1919) en células de levadura, utilizando jugo gástrico de caracol (*Helix pomatia*); aunque en ese momento no se conocía el mecanismo de degradación enzimática de la pared celular, las observaciones de este trabajo fueron muy importantes ya que el método permitió aislar grandes cantidades de protoplastos.

Cocking (1960) utilizó por primera vez sustancias que degradan la pared celular para aislar protoplastos de plantas superiores; obteniendo protoplastos de raíces de tomate mediante una preparación de celulasa cruda del hongo *Myrothecium verrucaria* (Ochatt y Power, 1992).

Los primeros trabajos con protoplastos de frutales de hueso no estaban orientados al cultivo de éstos, sino a estudios básicos. Fue hacia mediados de los años 80 cuando se desarrolló la investigación aplicada a la propagación (Ochatt, 1993). Para que las técnicas de mejora genética basadas en la manipulación de protoplastos sean factibles, es necesario que los protoplastos, una vez aislados y puestos en cultivo, sean capaces de regenerar la pared celular y por sucesivas divisiones de las células formar callos, y a partir de éstos, regenerar plantas enteras.

Su cultivo ofrece además la posibilidad de obtener híbridos somáticos mediante la fusión de protoplastos con técnicas de electroforesis y aplicación de PEG 6000 (polietilenglicol) (Ochatt et al, 1988), ó aplicar técnicas de transferencia de genes (Oliveira et al, 1996). En la práctica nos encontramos con muchos inconvenientes, especialmente con especies leñosas, donde las técnicas son difíciles y el número de especies en las que se logra el aislamiento de protoplastos o de células aisladas y la regeneración posterior de la planta es todavía escaso.

En frutales se ha conseguido la regeneración de plantas completas a partir de protoplastos con *Broussonetia kazinoki*, *Pyrus comunis* var *pyraster* L, *Pyrus comunis* var *Williams*, *Prunus avium* x *pseudocerasus*, *Prunus cerasus*, *Malus* x *domestica*, *Actinidia chinensis* (Ochatt y Power, 1988, 1992; Patat-Ochatt et al, 1988; Huancaruna et al, 1993) *Prunus avium*, *Prunus cerasifera* y *Prunus spinosa* (Ochatt, 1993; Revilla et al, 1987). Ya que el genotipo parece ser fundamental en la obtención y posterior regeneración de protoplastos (Matsuta, 1992; Ochatt, 1991; Hidano et al, 1988), en este trabajo se pretende poner a punto la técnica de obtención y cultivo de protoplastos de albaricoque, clon A-843, sometido a diferentes condiciones de cultivo y con diferentes tejidos vegetales

MATERIAL Y METODOS

El material utilizado corresponde al clon "A 843" de *Prunus armeniaca* L., albaricoquero franco de semilla, cultivado *in vitro* en el Departamento de Pomología de la Estación Experimental de Aula Dei y que no presenta incompatibilidades con las variedades comerciales de albaricoquero.

El material de partida fueron brotes micropropagados que se encontraban en medio de cultivo MS (Murashige-Skoog 1962), y para la obtención de protoplastos se ha utilizado mesófilo de hoja, brotes etiolados y suspensiones celulares.

Para ver la influencia que las condiciones de cultivo tienen sobre la viabilidad y regeneración de los protoplastos (Revilla et al 1987), se

utilizaron dos combinaciones diferentes de reguladores de crecimiento, IAA y BAP en uno y IBA y Z en otro, con las mismas concentraciones, 0,1 mM para las auxinas y 6,8 mM para las citoquininas. Antes de establecer los brotes en el medio IZ, estuvieron durante un mes en medio MS sin reguladores de crecimiento (MS0). El material se cultivó en dos condiciones de iluminación diferentes, fotoperiodo largo con 16 horas de luz y 8 de oscuridad, y con fotoperiodo corto, 16 horas de oscuridad y 8 de luz. La luz es suministrada por tubos fluorescentes Cool White, cuya irradiancia es de 35mM/m²s. La temperatura de la cámara de cultivo es de 24° C, sin oscilaciones significativas. También se obtuvo material etiolado cultivándolo en condiciones de total oscuridad durante un periodo de tres meses.

Para la obtención de callos se escogieron hojas procedentes de cultivo *in vitro* de brotes establecidos en los medios MS y MZ, sometidos a fotoperiodo corto y largo. Las hojas se cortaron transversalmente en cuatro fragmentos y se colocaron ordenadamente sobre los diferentes medios en placa. El medio utilizado fue el MS con los reguladores de crecimiento BAP (3,5mM) y 2,4-D con diferentes concentraciones (11,2mM, 22,4mM, 33,6mM, 44,8mM) que se citan como MQ4, MQ3, MQ2 y MQ1 respectivamente. La suspensión celular se obtuvo a partir de una porción de callo, colocándola en un erlenmeyer con medio líquido, en agitación a 80 rpm y en penumbra. La curva de crecimiento de la suspensión celular se realizó determinando el Volumen de Células Empaquetado (PCV) cada 24 horas y la viabilidad de las células se calculó con FDA, igual que para los protoplastos de mesófilo. Una vez establecida la suspensión, se subcultivó cada semana sustituyendo parcialmente el medio de cultivo por medio fresco.

$$PCV = \frac{\text{volumen que ocupa la masa celular}}{\text{volumen total}} \times 100 (\%)$$

Para la obtención de protoplastos de mesófilo de hoja y de material etiolado, el proceso pasa por una preplasmólisis, la digestión enzimática, y posteriormente diferentes lavados para eliminar los restos vegetales sin digerir y la purificación de los mismos para obtener protoplastos sin células vegetales con pared o muertas. Ya que la preplasmólisis se ha demostrado eficaz en la obtención de protoplastos, de acuerdo con lo descrito por diferentes autores (Power et al., 1990; Frearson et al, 1973), hemos utilizado la solución CPW (Tabla 1) con diferentes concentraciones de manitol o sacarosa como osmótico en todo el proceso de obtención de protoplastos. Así hemos llamado CPW13M a la solución con un 13% de manitol, CPW9M a la que tiene un 9% de manitol y CPW21S a la que tiene un 21% de sacatrosa. Todas ellas se esterilizan por filtración.

Tabla 1. Composición de la solución CPW (mg/l)

KH ₂ PO ₄	27,2
CaCl ₂ ·2H ₂ O	1480
MgSO ₄ ·7H ₂ O	246
KI	0,16
CuSO ₄ ·5H ₂ O	0,025
PVP-10	1% (peso/volumen)
pH	5,8

Para la obtención de protoplastos de mesófilo, las hojas deben ser de la parte superior del brote y han de estar totalmente expandidas. Se ha de pesar el material para poder determinar el rendimiento del proceso. Las hojas se cortan en secciones pequeñas transversalmente al nervio central para que la solución enzimática penetre con facilidad en el interior del tejido y se dejan dos horas en la solución CPW13M en preplasmólisis. La composición de las diferentes soluciones enzimáticas (Tabla 2) se escogieron de entre las descritas en la literatura (Ochatt 1993), o derivadas de resultados de experiencias anteriores (Andreu et al, 1995). La solución enzimática se dejó actuar durante 18-20 horas en oscuridad y agitación suave a 40 rpm.

Para la obtención de protoplastos de suspensiones celulares, se utilizaron de 8 ml de la misma y se centrifugaron durante 10 minutos a 50g. Se eliminó el sobrenadante y se añadieron 2ml. de la solución enzimática elegida. No se hizo preplasmólisis y la digestión enzimática se realizó durante 24 horas, en agitación a 40 rpm. y con luz difusa. A partir del primer subcultivo, se seleccionaron las suspensiones celulares de 2, 3, y 4 días de cultivo en combinación con cinco soluciones enzimáticas diferentes (Tabla 3). Hay que señalar que la solución enzimática denominada SE1 es la descrita por Matsuta (1992).

Tabla 2. Composición de las soluciones enzimáticas para mesófilo de hoja expresadas en tantos por ciento peso/volumen

	A	B	C	D
Celulasa R-10	-	1	2	1
Celulasa Fa	1	-	-	-
Hemicelulasa	1	1	1	-
Pectolyasa Y-23	0,1	0,1	0,1	0,1
Driselasa	-	-	-	0,5
MES	0,1	0,1	0,1	0,1
Glicina	0,04	0,04	0,04	0,04
PVP-10	0,1	0,1	0,1	0,1

Una vez finalizada la digestión enzimática y para eliminar los restos de mayor tamaño, se filtra el contenido de la placa a través de una malla de 50 mm. de diámetro de poro. Los protoplastos sin impurezas se obtienen en la interfase entre una solución de CPW 21S y el CPW13M con los protoplastos, centrifugando durante 10 minutos a 100 g. Una vez eliminada parcialmente la solución enzimática por centrifugación, se hacen sucesivos lavados por centrifugación, bajando progresivamente el osmótico y finalmente los protoplastos se dejan reposar durante una hora para que se estabilicen en la solución CPW9M.

Los protoplastos se cuantifican utilizando un hemocitómetro y se calcula su viabilidad utilizando FDA. El tamaño de los protoplastos se mide con la ayuda de un micrómetro ocular, eligiendo varios campos al azar y midiendo al menos 100 protoplastos. Los protoplastos se cultivaron en perlas de agarosa al 1,2% en medio de cultivo KM (Kao y Michayluk, 1975), utilizando el mismo medio líquido para evitar la desecación de la agarosa. La densidad de los protoplastos en el medio de cultivo fue 1×10^5 prot/ml y para evitar contaminaciones bacterianas se utilizó cefotaxima en concentraciones de 25 o 50 mg/l. Los protoplastos se cultivaron en oscuridad a 24° C.

Tabla 3. Composición de las soluciones enzimáticas utilizadas para la obtención de protoplastos de suspensiones celulares expresadas en tanto por ciento peso/volumen

	SE1	SE2	SE3	SE4	SE5
Celulasa R-10	2	2	1	1	-
Driselasa	1	1	-	1	2
Pectolyasa Y-23	0,1	0,1	0,1	0,5	0,5
Hemicelulasa	-	-	1	-	-
Macerozima	-	-	0,1	-	-
MES	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
PVP-10	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
Glicina	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04

El tiempo requerido en la división de los protoplastos varía en cada cultivo, pero en general, la primera división de protoplastos aislados de suspensiones celulares se produce a las 24-72 horas de cultivo, mientras que los obtenidos a partir de células del mesófilo se producen a los 2 a 7 días. Es necesario sustituir el medio líquido añadiendo medio fresco cada semana.

En los experimentos se estudiaron los efectos de las combinaciones de distintos factores que influyen en el proceso de obtención, aislamiento y cultivo de protoplastos.

De los factores que influyen durante el cultivo de los brotes, hemos estudiado el efecto del medio de cultivo MS con IBA y BAP y medio MS con zeatina y con AIA (MZ). Asimismo hemos utilizado brotes sometidos a fotoperiodos diferentes, el llamado fotoperiodo corto, con 8 horas de luz y 16 horas de oscuridad, y el fotoperiodo largo, con 16 horas de luz y 8 horas de oscuridad.

De los factores que influyen durante el aislamiento de protoplastos, hemos estudiado diferentes composiciones enzimáticas (Tablas 2 y 3) y por último, hemos utilizado diferentes concentraciones del antibiótico cefotaxima (0, 0,05 y 0,10 mg/ml) en el medio de cultivo para observar si tenía alguna influencia tanto en la regeneración como en el control de la contaminación.

Las combinaciones de factores que se estudiaron fueron las siguientes:

Para la obtención de protoplastos de mesófilo, se utilizaron hojas de brotes en medio de cultivo MS, en dos fotoperiodos de luz diferentes, y diferentes celulasas, la R-10 (1 ó 2%) y la Fa y también sin hemicelulasa.

En la obtención de protoplastos de tallos etiolados, se evaluaron los mismos factores que en el caso del mesófilo de hoja, lo que hace un total de 32 combinaciones diferentes.

Con las suspensiones celulares, se estudió el efecto del fotoperiodo y de la zeatina en la obtención de callo para el posterior establecimiento de las suspensiones celulares, con las que se probaron 5 soluciones enzimáticas diferentes, que llamaremos SE1, SE2, SE3, SE4 y SE5.

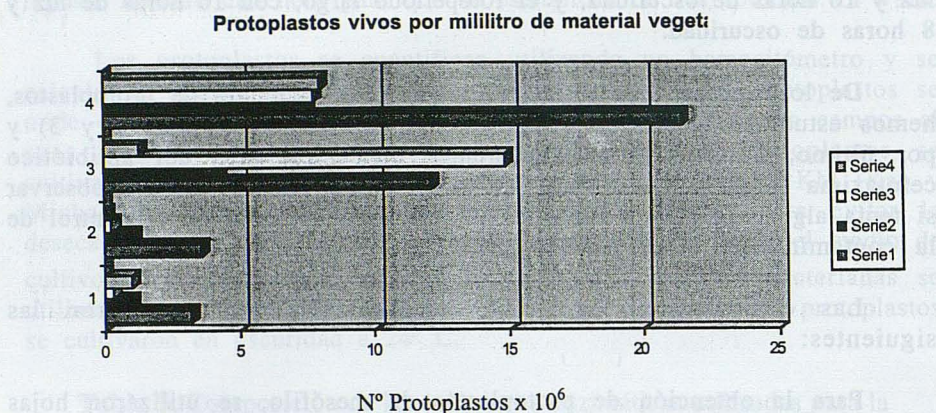
RESULTADOS

Mesófilo de hoja

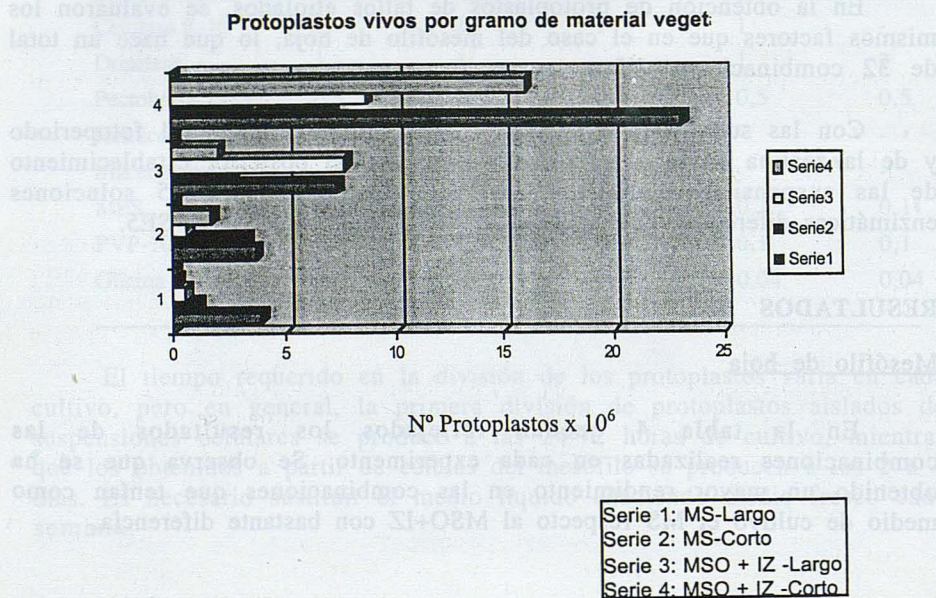
En la tabla 4 quedan reflejados los resultados de las combinaciones realizadas en cada experimento. Se observa que se ha obtenido un mayor rendimiento en las combinaciones que tenían como medio de cultivo el MS respecto al MSO+IZ con bastante diferencia.

Esto mismo se ve de forma más intuitiva en las gráficas 1 y 2, donde la serie nos indica el medio y fotoperiodo empleados durante el cultivo y los números 1,2,3,4 representan las cuatro soluciones enzimáticas: 1 Cel Fa, 2 Cel R-10, 3 Cel R-10 al 2% y 4 sin hemicelulosa (Tabla 2).

Gráfica 1: Rendimientos en protoplastos/ml de mesófilo de hoja



Gráfica 2: Rendimientos en protoplastos/gramo de mesófilo de hoja



Aunque los factores que afectan al aislamiento y cultivo de protoplastos están interrelacionados, es interesante analizar individualmente el efecto de cada uno de ellos. Y este análisis permite decidir que condiciones resultaron más favorables para la obtención de protoplastos.

Agrupando los distintos factores que se pueden modificar a lo largo del proceso observamos que el medio de cultivo que dio mayor rendimiento y viabilidad fue el MS y en cuanto a fotoperiodo, el largo resultó mejor que el corto, las viabilidades difieren en más del doble una respecto de la otra. La solución enzimática sin hemicelulosa dio los mayores tantos por cientos de viabilidad y rendimiento. Existe una mayor variabilidad de resultados si se utilizan soluciones enzimáticas distintas que si se varía el fotoperiodo o el medio de cultivo.

En cuanto a los factores que influyen durante el crecimiento de los brotes, se observa que hay diferencias más grandes en función de las condiciones a las que sometamos el material durante el crecimiento que las enzimas que se utilicen posteriormente. Por tanto se hace necesario considerar conjuntamente el medio con el fotoperiodo.

Los protoplastos cultivados en medio de agarosa dieron algunas divisiones que no se mantuvieron. La concentración de cefotaxima de 25 mg/l de medio y una densidad de protoplastos de 1×10^5 protoplastos/ml.

Tallos etiolados

En ninguno de los experimentos realizados (ver anexo 1), se obtuvieron protoplastos en número suficiente para cuantificar y medir su viabilidad.

Suspensiones celulares

Las hojas cultivadas en el medio MQ1 no dieron callo en ninguna porción de hoja y las cultivadas en el medio MQ2 no dieron callos suficientes para establecer una suspensión. En la porción de hoja donde más rápidamente se formaron callos fue en los trozos próximos al peciolo durante los 45 primeros días y a partir del día 50 fueron los trozos más alejados del peciolo los que formaron más callos. En cuanto a la influencia de las condiciones de cultivo de las hojas seleccionadas se puede decir que las combinaciones medio MS y fotoperiodo largo resultó la más favorable.

En las hojas cultivadas en medio MQ3 se observó una mayor rapidez a la hora de formar callo en los trozos distales de la hoja. En cuanto a las condiciones de cultivo de las hojas resultaron nuevamente

las combinaciones MS y fotoperiodo largo o MSO+IZ con fotoperiodo largo las más exitosas, pero esta vez la correspondiente al medio MS ocupaba el segundo lugar.

Las hojas cultivadas en medio MQ4 corresponden a los medios con las concentraciones más bajas de reguladores de crecimiento. Los fragmentos de hojas más rápidos a la hora de formar callo fueron el intermedio y el distal. Como en el caso anterior las mejores condiciones de cultivo de las que podían proceder las hojas utilizadas eran por orden en primer lugar el medio MSO+IZ con fotoperiodo largo, y en segundo el MS con fotoperiodo largo.

Una vez realizado este estudio todos los callos procedentes de las placas con medio MQ3 se unieron en una única suspensión, y se hizo lo mismo con las de las placas con medio MQ4. Para determinar el momento en que suspensión era la idónea para aislar protoplastos y se visualizaron al microscopio. A los quince días de haber establecido las suspensiones se tomó una muestra de las mismas y se observaron al microscopio. Los resultados se describen a continuación.

La suspensión MQ3 presentaba la mayor parte de las células alargadas, aunque existían también agrupaciones ya sea de células pequeñas o de células alargadas y en menor cantidad alguna célula pequeña aislada. Al mirar por el microscopio se obtuvieron los siguientes tantos por cientos:

Tipos de células	% del total	Tño(m)
-Células aisladas:		
Pequeñas con el citoplasma denso.	5%	95,6-119,5
Largas con el citoplasma denso.	20%	167,3-286,8
Largas sin citoplasma denso.	25%	167,3-239
"Extralargas" sin citoplasma denso.	10%	717-959 x 143,4
-Agrupaciones de células:		
Largas con citoplasma denso.	15%	478-717 de Δ
Largas sin citoplasma denso.	15%	717-959 de Δ
Pequeñas con citoplasma denso.	10%	239-358,5 de Δ

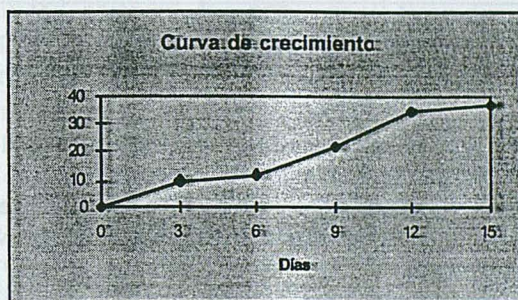
El tamaño de las células está expresado en micras y se detalla mediante un intervalo en el cual se encuentran las células encontradas pertenecientes a cada subdivisión especificada. Las agrupaciones de células se midieron imaginando un círculo de diámetro comprendido entre los parámetros indicados en cada caso.

En la suspensión MQ4 se observó que la mayor parte de las células eran pequeñas y redondeadas, estaban aisladas y tenían el citoplasma denso. También se encontraron agrupaciones de células pequeñas con citoplasma denso. Observando con fluorescencia se pudo comprobar una

mayor viabilidad de esta suspensión con respecto a la MQ3, por lo que se continuaron los experimentos únicamente con la suspensión MQ4. Para conocer cual era el mejor momento de realizar los ensayos se procedió a la realización de una curva de crecimiento. En la suspensión MQ4 se diferenciaron los siguientes tipos de células:

Tipos de células	% del total	Tño(m)
-Células aisladas:		
Pequeñas con el citoplasma denso.	86 %	95,6-119,5
Grandes vacuoladas.	5 %	239-358,5
"Extralargas" sin citoplasma denso.	3 %	358,5 -478
-Agrupaciones de células:		
Grandes vacuoladas sin citoplasma denso	1 %	597,5 x 239
Pequeñas con citoplasma denso.	5 %	478-597,5 de Δ

La curva se realizó midiendo el % del volumen de células empaquetado (%PCV) y la viabilidad con FDA cada tres días. La gráfica quedó de la siguiente forma:



En esta gráfica se puede observar como la suspensión celular se encontraba en el momento idóneo tanto en viabilidad como en la fase de crecimiento para realizar el primer subcultivo y a partir de ahí los experimentos.

Los experimentos se realizaron durante tres días consecutivos y los resultados se presentan en la tabla 5.

Tabla 5. Resultados de los experimentos con suspensiones celulares

DÍA 1	Protop. /ml	Viabilidad	Prot. Vivos / ml	% células sin dig.
S.E.1	$3,8 \times 10^5$	91%	$3,42 \times 10^5$	72%
S.E.2	$6,2 \times 10^5$	98%	$6,07 \times 10^5$	75%
S.E.3	$2,3 \times 10^5$	98%	$2,25 \times 10^5$	85%

S.E.4	$1,8 \times 10^5$	89%	$1,60 \times 10^5$	70%
S.E.5	$6,7 \times 10^5$	92%	$6,16 \times 10^5$	62%
MEDIA		93,6%	$3,90 \times 10^5$	72,8%

DÍA 2	Protop. /ml	Viabilidad	Prot. Vivos / ml	% células sin dig.
S.E.1	$4,6 \times 10^5$	87%	$4,00 \times 10^5$	71%
S.E.2	$6,9 \times 10^5$	90%	$6,21 \times 10^5$	87%
S.E.3	$3,3 \times 10^5$	77%	$2,54 \times 10^5$	78%
S.E.4	$2,8 \times 10^5$	87%	$2,43 \times 10^5$	73%
S.E.5	$9,9 \times 10^5$	93%	$9,20 \times 10^5$	60%
MEDIAS		96,8%	$4,87 \times 10^5$	73,8%

DÍA 3	Protop. /ml	Viabilidad	Prot. Vivos / ml	% células sin dig.
S.E.1	$4,1 \times 10^5$	85%	$3,48 \times 10^5$	85%
S.E.2	$6,3 \times 10^5$	87%	$5,48 \times 10^5$	88%
S.E.3	$2,9 \times 10^5$	65%	$1,88 \times 10^5$	87%
S.E.4	$2,5 \times 10^5$	84%	$2,10 \times 10^5$	89%
S.E.5	$7,9 \times 10^5$	90%	$7,11 \times 10^5$	74%
MEDIAS		82,2%	$4,01 \times 10^5$	84,6%

Considerando los valores medios se observa que la viabilidad va disminuyendo a lo largo de los días. El porcentaje de células sin digerir se incrementa desde el primer día hasta el tercer día. Se alcanza el día dos un óptimo en cuanto a rendimiento de protoplastos vivos/ml.

La media de protoplastos vivos considerando las soluciones enzimáticas se presentan en la tabla 6 y se puede observar que la de mayor rendimiento es la S.E.5 que carecía de Celulasa R-10.

Tabla 6: Valores medios del número de protoplastos obtenidos por ml en los experimentos de suspensiones celulares

S.E.1	S.E.2	S.E.3	S.E.4	S.E.5
$3,63 \times 10^5$	$5,92 \times 10^5$	$2,22 \times 10^5$	$2,04 \times 10^5$	$7,49 \times 10^5$

DISCUSIÓN

Teniendo en cuenta que se ha trabajado con material clonal, que por tanto todas las células tienen el mismo genotipo, se han conseguido resultados muy distintos. Incluso trabajando con hojas de un mismo explanto, y sometidas por separado a idénticos tratamientos, han dado

explanto, y sometidas por separado a idénticos tratamientos, han dado resultados muy diferentes entre sí (ver anexo 1). Autores de trabajos realizados con *Prunus persica* (Mills et al., 1994) y con *Prunus sp.* (Ochatt et al., 1992) coinciden en la importancia de este factor, y nosotros hemos intentado, sin éxito, determinar que tipo de hojas dan mejores resultados. Tan solo se ha observado que las hojas del tercio superior del brote dan mayores rendimientos (Farre et al., 1996). La presencia de zeatina en el medio en lugar de BAP, provoca un aumento importante en el tamaño de las hojas que influye en la obtención de protoplastos tanto en el rendimiento como en la viabilidad. En los resultados obtenidos se aprecia que la media de rendimiento obtenida para el medio de cultivo MS es superior a la de MSO+IZ (Tabla 4), lo cuál nos indica que a pesar de la apariencia inicial, la presencia de BAP como citoquinina en el medio de cultivo es más eficaz que la zeatina, con la misma concentración. La viabilidad también es mayor en experimentos en los que se ha partido de material vegetal cultivado en MS que en los que el material vegetal había sido cultivado en MSO+IZ. Hay que tener en cuenta que la zeatina es una auxina natural y es posible que se metabolice en los brotes de una manera diferente que el BAP y eso influya en el aislamiento de protoplastos. En cuanto al régimen de luz, la media de viabilidad obtenida con fotoperiodo largo fue de 57%, mientras que con fotoperiodo corto 27,68% y en cuanto al rendimiento, con fotoperiodo largo se consiguió una media de $12,4 \times 10^6$ prot/ml mientras que con el corto fue de $11,94 \times 10^6$ prot/ml.

Aunque para algunas especies del género *Prunus* se ha determinado una mezcla de enzimas eficaz para el aislamiento de protoplastos de mesófilo de hoja (Ochatt, 1990), se hace necesario definir con mayor precisión la combinación de enzimas específica para cada genotipo. Así para el clon "A 843" de *Prunus armeniaca* hemos obtenido los mejores resultados tanto en viabilidad como en rendimiento con la solución enzimática que no lleva hemicelulasa.

Con las suspensiones celulares se obtuvo menor rendimiento en la obtención de protoplastos que con mesófilo de hoja, aunque en la suspensión una gran parte de las células mantenían la pared celular después de la digestión enzimática, por lo que habría que optimizar el proceso buscando incrementar el rendimiento. En las suspensiones celulares es importante el proceso de establecimiento de la misma y el tipo de callo utilizado (Teasdale et al, 1983; Karim et al, 1997). En cuanto al callo, el que dió mejores resultados es el que se obtuvo con menor concentración de auxina, manteniendo la misma concentración de citoquinina, cultivados en oscuridad. El momento óptimo de la suspensión fue el segundo día después del subcultivo, en el que el porcentaje de células sin digerir fue de un 73%. La solución enzimática estaba compuesta por driselasa (2%) y pectoliasa (0,5%) en una solución

modificar la solución CPW (Matsuta, 1986) y probar otras combinaciones de enzimas que sean capaces de digerir la pared celular, mucho mas gruesa que en el caso de las células del mesófilo de hoja.

Por lo que se refiere al cultivo de protoplastos, tan solo se consiguió llegar a obtener crecimiento y divisiones mitóticas de protoplastos en aquellos cultivos en los que la concentración de cefotaxima fue de 25 mg/ litro y la densidad 1×10^5 protoplastos/ml. Concentraciones más altas de antibiótico resultaron tóxicas para los protoplastos y a menor concentración fueron inefectivas. En este sentido, se ha de determinar la composición de los medios de regeneración con diferentes de reguladores de crecimiento y otros compuestos que permitan mejorar los resultados obtenidos.

La combinación óptima de los factores estudiados, incluyendo el material donante, es a partir de hojas procedentes de brotes cultivados en medio de propagación MS (0,025 mg/l de IBA, 1,5 mg/l de BAP), con fotoperiodo largo (16 horas de luz y 8 horas de oscuridad) y utilizando una solución enzimática sin hemicelulasa, con lo que se han obtenido $28,78 \times 10^6$ protoplastos/gr (peso inicial) y hasta un 80% de viabilidad. En la actualidad, uno de los objetivos planteados es optimizar el aislamiento de protoplastos a partir de callos y suspensiones celulares que nos permita establecer un sistema eficaz de regeneración de patrones frutales.

BIBLIOGRAFIA

- Andreu, P.; Pascual, L. And Marín J.A., 1995.- Aislamiento de protoplastos en *Prunus insititia* L. VI Congreso de la SECH, pág. 298. Barcelona.
- Cocking, E.C., 1960.- A method for the isolation of plant Protoplasts and Vacuoles. Nature, set: 962-963.
- Farre, A., Andreu, P. 1996- Aislamiento de protoplastos del patron hibrido almendrox melocotonero 'Adafuel' a partir de células de mesófilo de hoja. Escuela Superior de Agricultura de Barcelona. Trabajo fin de carrera. 47pp.
- Frearson, E.M., Power, J.B. and Cocking, E.C.1973.- The isolation, culture and regeneration of *Petunia* leaf protoplasts. Development Biology, 33:130-137.
- Hidano, Y.; Niizeki, M. 1988.- Protoplasts Culture of Deciduous Fruit Trees. Scientia Horticulturae, 37: 201-216.
- Huancaruna, P.; and Schieder, O. 1993.- Plant regeneration from leaf protoplasts of apple. Tissue and Organ Culture 34: 71-76.
- Kao, K. N. And Michayluk, M. R. 1975.- Nutritional Requirements for Growth of *Vicia hajastana* and Protoplasts at a very Low Population Density in Liquid Media. Planta 126 (2): 105-110.

- Karim, M. A. And Adachi, T. 1997.- Cell suspension, isolation and culture of protoplasts of allium cepa. *Plant Cell Tissue and Organ Culture* 51: 43-47.
- Konider, Mohamed, Hauptman, Randal et al, 1984.- Callus formation from *Malus x Domestica* cv "Jonathan" Protoplast. *Plant Cell Report* 3: 142-145.
- Majeswska-Sawka, A. And Jazdzewska, E. 1997.- The effect of polyamines on the development of sugar beet protoplasts. *Biologia Plantarum* 39(4) 561-567.
- Matsuta, N. ; Irabayashi, T.; Akihama and Kozaki, Y. 1986.- Callus Formation from Protoplasts of Peach Cell Suspension Cultures. - *Science Hort.* 28:59-64.
- Matsuta, N. 1992.- Factors affecting protoplasts isolation and culture from suspension cells from peach (*Prunus persica*, L.). *Bull. Fruit trees Res. Stn.* : 22:59-66.
- Mills, D. And Hammerschlag, F. 1994.- Isolation of Cells and Protoplasts from Leaves of in vitro Propagated Peach (*Prunus persica*) Plants. *Plant Cell, Tissue and Organ Culture.* 36:99-105.
- Murashige and Skoog, F. 1962.- A revised medium for rapid growth and bioassays with tobacco tissue cultures. *Physiol. Plant.*, 15 (1962) 473-497.
- Ochatt, S. J. 1990.- Protoplasts technology and top-fruit tree breeding. *Acta Horticulturae* 280.
- Ochatt, S. 1991.- Strategies for Plant Regeneration from Mesophyll Protoplasts of the Recalcitrant Fruit and Farmwoodland Species *Prunus avium* L. (sweet / wild cherry), Rosaceae. *Plant Physiology.* 139:155-160.
- Ochatt, S. 1992.- The Development of Protoplast-to-Tree Systems for *Prunus Cerasifera* and *Prunus spinosa*. *Plant Science*, 81:253-259.
- Ochatt, S. 1993.- Regeneration of Plants from Protoplasts of Some Stone Fruits (*Prunus* spp.) *Biotechnology in Agriculture and Forestry* 23. Plant protoplasts and genetic Engineering IV. Springer, Berlin Heidelberg New York, 390pp
- Ochatt, S. And Cocking, E. C. 1987.- Isolation, culture and plant regeneration of Colt Cherry protoplasts. *Plant Science*, 50: 139-143.
- Ochatt, S. J.; Rech, E. L. Et al. 1988.- Long-Term effect of electroporation of enhancement of growth and plant regeneration of Colt Cherry protoplasts. *Plant Cell Report* 7: 393-395.
- Ochatt, J. And Power, J. B. 1988.- Plant regeneration from mesophyll protoplasts of William's Bon Chretien (Syn. Bartlett) pear (*Pyrus communis* L.) . *Plant Cell Reports* 7: 587-589.
- Ochatt, S. And Power, J. 1992.- Plant Regeneration from cultured Protoplasts of Higher Plants. *Comprehensive Biotechnology. Suppl.2. Cap.* 7:99-127.
- Oliveira, M.; Raquel, M.; Helena, M. 1996.- Kiwifruit leaf protoplasts competent for plant regeneration and direct DNA transfer. *Plant Science* 121: 107-114.
- Patat-Ochatt, E. M. ; Ochatt, S. J. 1988.- Plant regeneration from protoplasts of apple rootstocks and scion varieties. *Journal Plant Physiology* Vol.133. pp 460-465.
- Power, J. And Davey, M. 1990.- Protoplasts of Higher and Lower Plants. From: *Methods in Molecular Biology. Vol. 6. Plant cell and Tissue Culture.* Pollard and Walker (Eds.). The Humana Press. Clifton, New Jersey. Pag. 237-259.

Revilla, M. A.; Ochatt, S.; Doughty, S.; Power, J. 1987.- A General Strategy for Isolation of Mesophyll Protoplasts from Deciduous Fruit and Nut Tree Species. *Plant Science*, 50:133-137.

Teasdale, R. D. And Rugini, E. 1983.- Preparation of viable protoplasts from suspension- culture loblolly pine (*Pinus tadea*) cells and subsequent regeneration to callus. *Plant Cell Tissue Organ Culture* 2: 253-261.

Notice historique de l'Académie de Sciences Exactes, Physiques, Chimiques et Naturelles de Zaragoza.

par
José L. Viviente Mateu¹
Profesor Emérito
Universidad de Zaragoza

Con este título y por invitación, como Académico correspondiente de l'Académie des Sciences. Inscriptions y Belles Lettres de Toulouse, presentamos una comunicación a "La Conférence Nationale des Academies des Sciences, Lettres et Arts" que tuvo lugar en Toulouse los días 14, 15 y 16 de octubre de 1999, días en que se desarrollaron los actos que se especifican en el programa adjunto y que precede a la transcripción que en esta nota efectuamos de nuestra comunicación.

Debemos recordar que "La Conférence Nationale des Sciences, Lettres et Arts", surgió hace unos diez años en Francia como resultado de la agrupación de las Academias más antiguas de este país. La Conferencia se reúne (dos representantes por Académie componente) cada año, alternativamente en París por iniciativa del "Institut de France", y en provincias. La única ciudad de Francia que posee dos de tales Academias es Toulouse. Diversas razones, entre otras los trabajos de restauración del extraordinario edificio, Hotel d'Assézat, sede de l'Académie de Sciences. Inscriptions et Belles Lettres, impidieron que se reuniera en ella la "Conférence Nationale des Academies des Sciences, Lettres et Arts" hasta este año de 1999. Cumpliendo una tradición que hoy es norma, a las reuniones de la Conferencia se suele invitar a las Academias de los países limítrofes. Al ser el autor el único académico de ciencias de nuestra Academia de Ciencias E. F. Q. y N. de Zaragoza, que es correspondiente de la "Académie de Sciences, Inscriptions et Belles Lettres de Toulouse", junto a nuestra amplia relación de intercambios culturales, docentes y de investigación con la U.E.R. de Mathématiques de la Universidad Paul Sabatier de Toulouse desde 1968 (Profs. Mascart, Crumeirolle, Pradines, etc.), aceptamos con gran ilusión la invitación. Permítasenos recordar con sentimiento que en ésta nuestra primera estancia en Toulouse nos acompañó el Prof. D. Antonio Plans Sanz de Bremond, tristemente fallecido hace un año.

La reunión, rica en intercambios, propició interesantes encuentros entre especialistas de campos muy diversos, con resultados muy satisfactorios. Creo que el más mínimo deber ético nos exige dejar constancia en estas líneas del reconocimiento de todos los asistentes a la labor de organización y desarrollo de la reunión por los miembros de Toulouse, particularmente la que correspondió al Prof. Henri Mascart, Secrétaire Perpétuel de l'Académie des Sciences, Inscriptions et Belles Lettres de Toulouse.

1) Al final del texto se incluye el programa de actividades desarrolladas en la Conférence Nationale des Academies des Sciences, Lettres et Arts.

Mesdames et Messieurs:

Académicien Numéraire de l'Academia de Ciencias Exactas, Fisico-Químicas y Naturales de Zaragoza et membre correspondant de l'Académie des Sciences Inscriptions et Belles-Lettres de Toulouse depuis longtemps, il est pour moi un grand honneur et plaisir d'avoir été invité à cette réunion de la "Conférence Nationale des Académies de Sciences, Lettres et Arts" pour représenter l'Academia de Zaragoza, particulièrement, parce que cette année 1999 la réunion se tient à Toulouse dans ce bel Hotel d'Assézat. Ceci nous permet, premièrement, de jouir, une fois de plus, de l'accueil humain de mon collègue Mr. le Prof. Henri Mascart, Secrétaire Perpétuel de votre Académie et membre correspondant de l'Académie de Zaragoza depuis 1967, et, en deuxième lieu, d'avoir l'occasion de vous présenter un bref rapport des activités les plus importantes de l'Académie des Sciences Exactes, F. Q. et N. de Zaragoza depuis sa fondation institutionnelle le 27 Mars 1916, et un résumé des échanges avec votre Académie de Toulouse.

L'Académie jusqu'en 1963.²

De l'activité scientifique de "l'Academia de Ciencias Exactas, Fisico-Químicas y Naturales de Zaragoza" pouvons dire qu'elle commence vers 1886 avec les propositions sur sa constitution de Mr. le Doyen de la Faculté des Sciences de Zaragoza. Mr. le Prof. José Muñoz del Castillo, déclarations qui sont considérées comme la source d'assimilation et d'impulsion des idées scientifiques dans la société d'Aragón. compte tenu de la collaboration des différents Professeurs et enrichi par des échanges d'informations scientifiques avec différents membres d'autres Académies d'Europe. Il faut pourtant attendre le 17 Avril 1914, pour que la "Junta de la Facultad de Ciencias de Zaragoza" sous la direction de son Doyen Paulino Saviron Caravantes et à la demande des professeurs García de Galdeano et Rius y Casas, accorde sa fondation et constitue une Commission chargée de son organisation sous la présidence de García de Galdeano et formée par les professeurs Rius y Casas par la Section de Sciences Exactes, Rocasolano par celle de Chimie, Martinez Risco par celle de Physique et Ferrando Mas par celle de Sciences naturelles.

Une fois réalisée la rédaction de son règlement (il semble influencé par celui de la Royale Académie de Sciences de Barcelona) et nommés 21 académiciens, ceux-ci tous membres fondateurs, réunis le 27 de mars de 1916, discutent et approuvent le Règlement. nomment le Bureau et les Bureaux des trois Sections initiales (Sciences exactes, physico-chimiques et naturelles) et considèrent constituée l'Académie dont la siège est fixé dans le bâtiment de la Faculté des Sciences. La séance inaugurale eut lieu le 28 mai 1916 et suposa le soutien des forces vives et de la société d'Aragón. Son Président Mr. le Prof. Zoel García de Galdeano considère l'Académie, dans son discours, comme le "le plus haut échelon des sociétés culturelles" et "avec un but complémentaire de celui des Universités".

2) L'auteur Remercie Elena Ausejo Martinez pour les données jusqu'à 1936, puisées dans son travail: " La Academia de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales de Zaragoza (1916-1936)". Cuadernos de historia de la Ciencia. Zaragoza, 1987.

Les membres fondateurs étaient, a la Section Exactes: Z. García de Galdeano, M. Lorenzo Pardo, M. Mantecon, P. Mozota, J. Rius y Casas, A. Ruiz Tapiador et G. Silvan González; a la Section de Physique-Chimie: G. Calamita, H. Gimeno, A. G. Rocasolano, R. P. Marcolain, M. Martinez Risco, J. M^a. Plans y Freire (le premier espagnol à bien comprendre le Calcul Différentiel Extérieur et a suivre les travaux d'Einstein) et P. Saviron. Finalement, la Section de Sciences Naturelles était, de beaucoup, la plus active avec un plus grand nombre de publications. Furent membres fondateurs les médecins Pedro Ramón y Cajal et Juan Bastero Lerga, Longinos Navas, Jesús M^a Bellido Golferich, Pedro Ferrando Más (Catedrático spécialiste du microscope polarizante Fedoroff, de mineralogie microscopique et biologiste enthousiste) et Cayetano Ubeda Saráchaga.

Les Bureaux des trois Sections initiales sont composés au maximum par dix membres numéraires par section; en outre pouvaient être nommés dix Académiciens correspondants nationaux et dix autres Académiciens correspondants étrangers. Dans le Règlement est fixé le protocole de nomination, les droits et obligations des membres, la période d'exercice et le renouvellement des membres des différents Bureaux, et un Secrétaire Perpétuel (bien qu'aujourd'hui cette charge ait disparu), etc. Le financement était irrégulier, tant par des subventions, les suscriptions à la revue de l'Académie et la vente des publications extraordinaires, qu'à l'aide de subventions annuelles d'un montant fixe de caractère budgétaire pendant certaines périodes. En dehors des activités, telles que la rédaction des mémoires des séances des assemblées, conférences et articles de recherche des membres au siège de l'Académie, les conférences à l'étranger et dans des centres culturels ou sociaux d'Aragón, on doit considérer une série de "Cursos de Conferencias" développées entre 1920 et 1931, en un certain sens, précurseurs des cours d'été de Jaca, et la rédaction ou la composition de la revue.

Le commencement de la vie académique est profondément marquée par les mathématiciens. Principalement par l'autorité scientifique du mathématicien Mr. le Prof. Zoel Garcia de Galdeano y Yanguas, premier Président en activité jusqu'en 1922, date à laquelle il prend sa retraite. En 1922 le poste de Président est occupé par le chimiste Prof. Antonio de Gregorio Rocasolano qui resta jusqu'au 21 décembre 1932; en 1933 il est remplacé, jusqu'en 1935 inclus, par le Prof. Gonzalo Calamita Alvarez qui, à son tour, est remplacé par le Prof. Paulino Saviron Caravantes qui resta Président jusqu'en 1940 date à laquelle est nommé le naturaliste Prof. Francisco Pascual de Quinto (baron de Tamarit) jusqu'à 1967, date où il est remplacé par le Physicien Prof. Justiniano Casas Pelaez jusqu'en 1977, date à laquelle est nommé Président le mathématicien Juan Sancho San Roman jusqu'en 1986; il est remplacé par le chimiste Prof. Enrique Meléndez Andreu qui resta en poste jusqu'en 1996, date à laquelle lui succédera le naturaliste Prof. Horacio Marco Moll, actuel Président de l'Académie. De 1919 a 1935 Ruiz Tapiador sera le trésorier remplaçant Mr. le Prof. Juan Bastero Lerga qui fut le trésorier de 1916 a 1918.

Plus tard deviennent membres de la section des Sciences Exactes: Gonzalo González Salázar, Antonio Lasierra Purroy, Pedro Pineda, Teodoro Rius, José Hernández Gasque, Francisco Cebrian et Fernández Villegas. Dans la période de García de Galdeano, c'est-à-dire pendant les trois ou quatre premières années d'existence de l'Académie, les seules publications sont des articles de mathématiques. Depuis 1916 sont nommés académiciens correspondants les mathématiciens J. G. Álvarez Ude, R. Benjumea, R. Gelabert, M. de la Hoz, J. Marvá, J. Rey Pastor, E. Terradas, L. Torres Quevedo y J. M. de Zafra. Comme académiciens correspondants étrangers sont nommés les mathématiciens: en 1923 le professeur Jaques Hadamard

(dont nous avons eu l'honneur et grand plaisir de rencontrer dans les jardins de la Cité Universitaire à Paris en 1958), et en 1924 Albert Einstein.

Nommé en 1919 Viceprésident le chimiste Mr. le Prof. Rocasolano, en 1922 devient Président de l'Académie et restera à ce poste jusqu'à la fin de 1932. Dans cet intervalle, ou plutôt de 1920 à 1936 il est possible distinguer deux périodes. La première de 1920 à 1927 où l'Académie, sous le secrétariat de Lorenzo Pardo, développe une importante activité sociale reconnue comme "le plus grand mouvement régional de base scientifique" et qu'entre autres effets aboutit à la construction du barrage de l'Ebre à Reñosa et à la création de la Confédération Syndicale Hydrographique del l'Ebre dont la Direction Technique est occupée en 1927 par Lorenzo Pardo qui démissionne de la charge de Secrétaire de l'Académie. La deuxième période, de 1927 à 1936, où l'Académie se maintient pratiquement grâce à la Section de Sciences Naturelles. Précisément en 1922 est nommé comme Viceprésident le distingué entomologue Mr. le Prof. Longinos Navas (membre de 24 académies et sociétés scientifiques, avec la publication de plus de six cents livres et brochures et de plus d'un millier de rapports et notes, fruit de ses classifications des neuroptères bien connu à Paris, Londres, Vienne, Berlin, Tokio, Changai et Hong-Kong).

De même la Section de Physique-Chimie, reçoit de nouveaux membres: En 1917 deviennent membres le Prof. Jerónimo Vecino, spécialiste en Géophysique et Météorologie, décédé en 1928; et l'Ingénieur Industriel Juan Usandizaga, Directeur Technique des Sociétés Electriques de Saragosse et qui en 1916 forma la Commission des "Etudes Electrosidérurgiques" pour la quitter en 1924. En 1923 rentre à l'Académie Juan B. Bastero Beguiristain (élève de Rocasolano et plus tard Professeur de Physique-Chimie), ainsi que le mathématicien Santiago Pí y Sunyer. En 1930 l'entrée de Juan Cabrera Felipe, Professeur d'Acoustique et d'optique, avec celle du Prof. José M^a Iñiguez Alméch en 1933, Professeur de Mécanique Rationnelle et de Mathématiques pour de Chimistes, et avec celles de José Pueyo y Luesma, élève de Saviron, et de Mariano Velasco, Professeur d'optique et Radiations. En 1936 Juan Martín Sauras, Professeur de Chimie, marque un certain renouvellement des générations. qui sera arrêté par la guerre civile et ne se poursuivra pas qu'après 1943 avec l'entrée de Julián Bernal Nievas et Mariano Tomeo Lacrué. Ce dernier, en 1960, organise le "1^{re} Congrès National d'Irrigation" dont l'inauguration a lieu le 28 octobre de 1963 et dont les séances auront lieu à Huesca, Lérida, Ejea et Alcañiz (cette dernière le 7 juin 1964).

L'activité académique de la Section de Physique-Chimie depuis 1920 est, en général, d'une participation supérieure que à celle de la Section de Sciences Exactes, de plus c'est aussi pendant les années 20 que commencent les contacts et échanges avec d'autres académies et universités européennes. Comme membres correspondants nationaux nous trouvons Blas Cabrera y Felipe, Rafael Luna y Noguerras, José A. Perez del Pulgar, Felipe Lavilla (Professeur de Chimie organique de L'Université de Madrid), José M^a Madariaga, électrotechnicien du Corps d'Ingénieurs des Mines, Eduardo Victoria, Luis Bermejo Vida et Simon Benitez Padilla. Tandis que comme correspondants étrangers, fruit des contacts de Rocasolano, nous trouvons: les Profs. Charles Henry (1920), de la Sorbonne, Jean Perrin (1922), Paul Sabatier (1923), Doyen de la Fac. Sciences de Toulouse, et H. Bechhold (1927), Univ. de Darmstadt.

La Section de Sciences Naturelles était, de beaucoup, la plus active avec un plus grand nombre de publications. Nous avons cité les membres fondateurs. En 1917 l'Ingénieur des Mines Angel Gimeno Cunchillos nommé Académicien développe une grande activité jusqu'en 1926. En 1919 entrent les ingénieurs: Agricole José Cruz

Lazaparan, et des Monts (Bois et Forêts) Nicolas R. García Cañada, qui disparaît en 1933. De 1921 à 1929 deviennent Académiciens Mr. l'Abbé de San Miguel de los Navarros, Vicente Bardavíu, amateur de l'archéologie, collaborateur de P. Paris et R. Thouvenot de l'Ecole des Hautes Etudes de Bordeaux. Autres membres de l'Académie sont: depuis 1924 Andrés Giménez Soler, 1930 Pascual de Quinto et Alfonso Osorio-Rebellón, 1934 Emiliano Ladrero Ramón, et en 1936 Rafael Ibarra Méndez. Les conférences sont nombreuses, principalement sur des questions en rapport avec les Pyrénées, comme celle du glacierologue français Abate Gaurier ou celles de Gaussen ou de José Miguel Barandiaran.

Pendant les trois années de la guerre civile et jusqu'en janvier 1963, l'activité de l'Académie est relentie; faute de moyens les publications sont presque inexistantes et la seule activité se réduit aux quelques réunions pour la nomination de nouveaux académiciens et la publication de leurs discours d'entrée ainsi que des discours de début des cours. Même, on trouve des périodes comme celle du 1^{er} décembre 1957 au 15 janvier 1963 où il n'existe rien de consigné. Pourtant la revue de l'Académie, quoique de façon très irrégulière, était publiée. Signalons que, dans la période de 1940 à 1963, sont nommés membres: à la Section d'Exactes le Prof. Rafael Rodríguez Vidal électif en 1954 et numéraire en 1959, le Prof. Antonio Plans Sanz de Bremond électif en 1955 (numéraire en 1969), et le Prof. Rafael Cid Palacios nommé électif en 1957 (numéraire en 1979); à la Section de Physique-Chimie est nommé en 1943 Vicente Gomez Aranda, Professeur de Chimie organique; et à la Section de Sciences Naturelles en 1945 Agustin Alfaro Moreno, Ingénieur Agronome, spécialiste en Fitopatologie et Entomologie, Directeur du Centre de Patologie Végétal de Zaragoza.

L'Académie de 1964 à nos jours

Cette année 1964, avec le même Président, marque un certain point d'inflexion dans la vie de l'Académie à cause d'une relative renaissance de ses activités, dédoublement effective de la Section de Physique-Chimie en deux Sections autonomes: une de Physique et une autre de Chimie, ainsi qu'un progressif rajeunissement des postes de responsabilité, particulièrement de celui chargé des éditions de l'Académie qui doit actualiser sa revue et renouveler les échanges avec d'autres académies et universités malgré la manque de moyens financiers.

En 1966 l'Académie de Sciences Exactes, Physiques, Chimiques et Naturelles de Zaragoza fête le 50^e anniversaire de sa fondation avec de nombreuses manifestations culturelles toutes présidées par son Président Excmo. Sr. D. Pascual de Quinto, baron de Tamarit, qui prend sa retraite en 1975. En 1966 devient Académicien Numéraire de la Section de Physique le Prof. Justiniano Casas Pelaez, Catedrático de optica, qui en 1967, par élection, est nommé nouveau Président de l'Académie. Le Prof. Justiniano Casas Pelaez, bien considéré par le Ministère et le C.S.I.C. à Madrid, réussit à obtenir que l'Académie soit prise en charge par le budget annuel du C.S.I.C. et qu'ainsi l'Académie puisse couvrir les dépenses de la publication de sa revue et de ses monographies, et cherche à régulariser ses nombreux échanges.

L'Académie au début de cette période se renouvelle très lentement malgré l'existence de nombreuses vacances. En 1964 est nommé Académicien Numéraire: par la Section de Chimie Celso Gutiérrez Losa, Professeur de Physico-Chimie. En 1966 la Section de Sciences Exactes nomme Académicien Numéraire Juan Sancho San Román, Professeur de Mathématiques et la Section de Chimie Rafael Usón Lacal, Professeur de Chimie Inorganique; et la Section de Sciences Exactes, en 1969,

Antonio Plans Sanz de Bremond Professeur de Mathématiques, mais il faut attendre 1979 pour trouver deux nouveaux académiciens numéraires, à la Section de Sciences Exactes avec le Prof. d'Astronomie Rafael Cid Palacios, et à la Section de Physique avec le Prof. de Radiologie de la Faculté de Médecine Francisco Marín Gorriz. Deux ans plus tard, en 1981, devient Académicien Numéraire pour la Section de Chimie le Prof. Luis Antonio Oro Guiral, et dans la même Section le Prof. Enrique Meléndez Andreu, Professeur de Chimie organique, en 1982. La Section de Sciences Naturelles nomma, en 1983, Académicien Numéraire le Prof. Horacio Marco Moll, Professeur de Biologie et en 1984 la Section de Sciences Exactes reçoit comme Académicien Numéraire José L. Viviente Mateu, Professeur de Mathématiques et en 1988 devienne Académicien Numéraire Mariano Gasca Gonzalez, qu'à l'époque, en 1967, ont été désignés correspondants étrangers le Prof. Claus Miller de la Technische Hochschule de Aachen; Helmut H. Schefer du Mathematisches Institut Univ. Tübingen; et Henri Mascart de l'Université Paul Sabatier de Toulouse. De même, depuis 1968, Alberto Galindo, Clemente Saenz, Eusebio Bernabeu, Baltasar Rodriguez Salinas y Javier Etxayo Miqueo, sont académiciens correspondants nationaux.

En 1968, sur invitation du Prof. Plans, le Prof. H. Mascart, nommé Académicien correspondant en 1967, visite le Département de Géométrie et Topologie de l'Université de Saragosse et donne l'occasion d'établir des rapports avec l'Université de Toulouse et son Académie de Sciences que se sont prolongé jusqu'en 1986, avec le développement d'une série d'activités: comme différents cours de "Collaboration à niveau du 3^{ème} Cycle" entre le U.E.R. de Maths. de Toulouse III et le Département de Géométrie et Topologie de l'Université de Saragosse sous la responsabilité des Profs. A. Crumeyrolle et José L. Viviente. Patronné par l'Ambassade de France en Espagne et l'Université de Saragosse à l'aide du programme de recherches du Professeur José L. Viviente Mateu jusqu'en 1982 où nous avons participé aux Journées Fermat. La collaboration se prolongea jusqu'en 1989 avec les Professeurs H. Mascart et J. Pradines, mais à un niveau personnel, on doit signaler notre communication sur l'enseignement de la Géométrie à l'Université aux 3^{èmes} Rencontres Européennes de l'Enseignement Supérieur" à l'Université de Toulouse II, du 16 au 18 Février 1989. Dans cette collaboration, en plus de quelques élèves du Prof. Plans, ont participé nos élèves de l'époque, en particulier, les actuels Professeurs Mme. Maite Lozano Imizcoz. Eladio Domínguez Murillo et José F. Saenz Lorenzo. Nos conférences ont traité sur la structure homotopique des variétés (homologie et cohomologie, suites spectrales, théorie K et cobordisme, et applications à l'étude du structure quotient des feuilletages).

Pourtant de 1983 à 1996 il n'existe pas d'autre activité enregistrée que celle de la nomination et réception des nouveaux académiciens avec la publication de la revue et des monographies. Aucune autre activité de ses membres n'est enregistrée par l'Académie, du fait qu'il n'y a pas d'organisme qui la subventionne.

En 1977 le Prof. Casas démissionne de la Présidence de l'Académie et est nommé Président le Prof. Juan Sancho San Roman qui le resta jusqu'en 1986. On réussit à obtenir une mise à jour de la publication de la revue et des monographies publiées par l'Académie. Il faut savoir qu'aujourd'hui les échanges avec d'autres Académies, Sociétés scientifiques, etc., absorbe 44 exemplaires en Espagne et 127 à l'Etranger. Les échanges culturels, d'enseignement ou de recherche de ses membres sont couverts par d'autres moyens spécifiques comme les programmes de recherche ou d'enseignement au niveau du troisième Cycle cités précédemment. De ce type sont principalement les échanges entre les Universités de Toulouse et Saragosse.

De 1986 à 1996 le poste de Président est assuré par l'Académicien Prof. Enrique Meléndez, qui en général suit une action analogue à celle du Prof. Sancho bien qu'il devra faire face à quelques problèmes de caractère social. Les Académiciens correspondants nationaux à cette époque étaient: En plus de ceux nommés en 1968, on trouve depuis 1989 José Barluenga, et depuis 1992 José Antonio Madariaga, Oriol Riba Arderiu, José M^a Montesinos, et Nacere Hayeck Kalik.

En 1996 est nommé Président de l'Académie le Prof. Horacio Marco Moll, Professeur de Biologie, qui a pris en charge l'actualisation du nombre d'académiciens de chaque Section, et d'organiser différents cours ou cycles de conférences: un sur la Paléontologie Aragonese en 1997; un autre en 1998 intitulé "Nuevas tendencias en Paleobotánica" avec la participation de professeurs étrangers, qui a été publié dans la monographie n° 13 de l'Académie. on a restauré aussi la mise au concours des Prix de Recherche pour des étudiants terminant leur licence.

Pour finir signalons que, comme fruit de l'actualisation du nombre de membres de chacune des sections de l'Académie, ont été reçus Académiciens Numéraires depuis 1989 les personnes suivantes: A la Section de Sciences Exactes, les Professeurs de Mathématiques:

En 1988 Mariano Gasca González;

En 1998 José Garay de Pablo, Manuel Calvo Pinilla, et M^a. Teresa Lozano Imizcoz;

En 1999 Eladio Domínguez Murillo.

Récemment ont été nommés "Académiciens Électifs" le Professeur d'Analyse Jesús Bastero Eleizalde et celui d'Astronomie Antonio Elipe Sánchez, on attend, donc, la lecture de leurs discours d'entrée à l'Académie pour devenir Numéraires et, à ce moment-là, la Section de Sciences Exactes sera complète et très rajeunie.

A la Section de Sciences Physiques, les Professeurs de Physique:

En 1996 Luis Boya Balet;

En 1997 Rafael Nuñez-Lagos Roglá;

En 1999 Javier Sesma Bienzobas.

Restent encore cinq sièges à pourvoir, bien que soient déjà électifs trois autres candidats.

A la Section de Sciences Chimiques, le Professeur de Chimie:

En 1997 José S. Urieta Navarro.

Restent encore six sièges à pourvoir, bien qu'il y ait déjà deux autres électifs.

A la Section de Sciences Naturelles, ont été nommés Académiciens Numéraires:

En 1993 le Prof. Joaquín Villena Morales;

En 1997 le Chercheur Juan Marín Vázquez;

En 1998 le Prof. Eladio Liñan Guijarro et le Prof. Mateo Gutierrez Elorza;

En 1999 le Prof. Carlos Gomez - Moreno, (à rentrer le 21 octobre 1999).

Restent encore quatre sièges à pourvoir, bien qu'il y ait déjà deux autres électifs.

Voilà donc, en bref, l'état actuel de notre Académie. En même temps j'ai l'honneur de vous transmettre le voeu de ses membres d'établir une plus étroite collaboration entre nos deux Académies.

José L. Viviente Mateu
Profesor Emérito
Facultad de Ciencias
Universidad de Zaragoza
e-mail: viviente @ posta.unizar.es

L'Académie des Jeux Floraux

L'Académie des Sciences, Inscriptions et Belles Lettres de Toulouse

Reçoivent

**La CONFERENCE NATIONALE
DES ACADEMIES DES SCIENCES, LETTRES ET ARTS**

TOULOUSE : OCTOBRE 1999

JEUDI 14 OCTOBRE 1999

HÔTEL D'ASSEZAT (Palais des Académies)

14 h 30 Accueil des congressistes.

16 h 15 Allocution de bienvenue
par Monsieur Lucien REMPLON,
membre d'honneur de l'Académie des Sciences,
Inscriptions et Belles Lettres,
président de l'Union des Académies et Sociétés Savantes.

16 h 30 « *Les grandes heures de Toulouse, ville des Lettres, Arts et Sciences* »
par Monsieur Guy LAZORTHES,
membre de l'Institut « Académie des Sciences »,
censeur de l'Académie des Jeux Floraux,
président honoraire de l'Académie des Sciences,
Inscription et Belles Lettres.

17 h 15 Présentation de la Conférence Nationale
par Monsieur Patrice BONNEFOUS,
président de la Conférence Nationale des Académies.

17 h 45 Adresses des membres étrangers au nom
des Académies représentées

Monsieur José-Luis VIVIENTE MATEU
Académie des Sciences exactes, physico-chimiques
et naturelles de Saragosse

S.E. Antonio SERRANO de HARO, Ambassadeur d'Espagne
Correspondant de l'Académie de l'Histoire, Madrid,
Maître es Jeux Floraux.

Monsieur Jean SCHOOS
Institut Grand-Ducal de Luxembourg,
Académie de Wiesbaden
Maître es Jeux Floraux.

18 h 30 Réception Salle des Illustres de l'HÔTEL DE VILLE
par Monsieur Dominique BAUDIS, Député-Maire.

10 h 30 Dîner dans la Salle des Colonnes
de l'HÔTEL-DIEU SAINT-JACQUES.

VENDREDI 15 OCTOBRE 1999

HÔTEL D'ASSEZAT (Palais des Académies)

"DU PASTEL A L'ESPACE"

- 9 h** "*Du pastel de la Renaissance à la renaissance du pastel*"
par Monsieur Paul REY,
président honoraire de l'Académie des Sciences,
Inscriptions et Belles Lettres.
- 9 h 30** "*Le siècle d'or toulousain : point de vue de l'Histoire*"
par Monsieur Bartolomé BENNASSAR,
mainteneur de l'Académie des Jeux Floraux,
membre correspondant de l'Académie des Sciences,
Inscriptions et Belles Lettres.
- 10 h 15** "*Le siècle d'or toulousain : point de vue des Arts*"
par Monsieur Guy AHLSELL de TOULZA,
membre correspondant de l'Académie des Sciences,
Inscriptions et Belles Lettres.
- 11 h** "*Toulouse et la conquête de l'Air et de l'Espace*"
par Monsieur André TURCAT,
mainteneur de l'Académie des Jeux Floraux.
- 12 h** Départ pour la CITÉ DE L'ESPACE.
- 13 h** Déjeuner, puis visite de la Cité de l'Espace.
- 18 h 30** Réception à l'HÔTEL DU CONSEIL GÉNÉRAL,
par Monsieur Pierre IZARD,
président.

CHAPELLE DES AUGUSTINS
(ancien couvent, actuellement Musée Municipal).

20 h Concert d'Orgues par Willem JANSEN

20 h 45 Dîner de Gala.

PROGRAMME DES ACCOMPAGNANTS

VENDREDI 15 OCTOBRE 1999

9 h 30 Réunion, devant l'horloge de la Mairie, Place du Capitole.

Première visite accompagnée par les guides-conférenciers de l'Association Toulousaine d'Histoire de l'Art (ATHA).

*Les grands monuments de Toulouse
Le Capitole, Saint-Sernin, Les Jacobins,
l'Hôtel de Bernuy, l'Hôtel d'Assézat.*

SAMEDI 16 OCTOBRE 1999

9 h 30 Réunion, devant l'horloge de la Mairie, Place du Capitole.

Deuxième visite accompagnée
par les guides-conférenciers de l'ATHA.

*Les demeures du quartier Saint-Rome.
Les quais de la Garonne et le Bazacle.*

Durée des visites, environ deux heures.



REMERCIEMENTS A :

MAIRIE DE TOULOUSE, CONSEIL RÉGIONAL, CONSEIL GÉNÉRAL,
AMIS ASSÉZAT, FRAM, EDF/GDF, CAISSE DES DÉPÔTS ET CONSIGNATIONS

SAMEDI 16 OCTOBRE 1999

ANCIENS MOULINS DU BAZACLE

- 9 h** Assemblée Générale Annuelle de la Conférence.
Les membres de la Conférence sont priés de faire connaître les questions qu'ils souhaiteraient voir aborder.
- 11 h** Visite de l'exposition organisée par
l'Académie des Sciences, Inscriptions et Belles Lettres,
"Images des sciences et science de l'image"
présentée par Monsieur Paul REY.
- 13 h** Buffet.
- 14 h 30** Reprise de l'Assemblée Générale Annuelle.
- 16 h 30** Fin des travaux de la Conférence.

ASSEMBLÉE GÉNÉRALE ANNUELLE de la CONFÉRENCE NATIONALE DES ACADÉMIES DES SCIENCES, LETTRES ET ARTS

**9 h - 11 h
14 h 30 - 16 h30**

- 1) Rapport moral du Président.
- 2) Rapport du Secrétaire Général.
- 3) Rapport du Trésorier :
Précédent exercice,
prochain exercice,
cotisation annuelle.
- 4) La Conférence Nationale de l'an 2000.
- 5) La vie de l'Association :
 - la révision des statuts
 - la liaison permanente entre les Académies
 - le bulletin périodique Akademos
 - les relations avec l'Académie de la Méditerranée
 - les archives de la Conférence
 - les subventions
 - les frais postaux pour l'envoi des mémoires.

ENSEÑANZAS DE LA ACADEMLA DE MATEMATICAS DE MADRID (CREADA PoR FELIPE II)

Por

Concepción Romo Santos.

Catedrática de Álgebra.

Universidad Complutense de Madrid.

Introducción.

Juan de Herrera nació en Mobellán, estudió en la Universidad de Valladolid y siguiendo a Carlos I recorrió Flandes e Italia. En 1.556 volvió a España acompañando a Carlos I en su retiro de Yuste, hasta su muerte en 1.558. En este momento Juan de Herrera se incorpora a la corte de Felipe II y es enviado a Alcalá de Henares para diseñar las figuras geométricas del Libro de Saberes, de Alfonso X el Sabio.

En 1.562 entra al servicio de Juan Bautista de Toledo, director de la construcción del Monasterio de El Escorial.

En 1.567 muere Juan Bautista de Toledo y en virtud de la fama adquirida como hombre esmerado en la realización de figuras geométricas, se le encarga la dirección en la continuación de las obras de El Escorial. Los descubrimientos de Juan de Herrera de máquinas y gruas, suponen una ayuda inestimable para la construcción de tan impresionante obra.

Otro de los grandes logros matemáticos de Juan de Herrera fué la creación de la Academia de Matemáticas en Madrid. Es de sobra conocido que Felipe II fué un personaje abierto a todo el sabor científico y un gran defensor del estudio de las Matemáticas. Convencido el rey de que la carencia de artilleros (era necesario contratar artilleros italianos para los ejércitos del imperio), y de que la profusión de errores en la confección de las cartas de navegar, se debían a una falta de formación matemática, Felipe II, a instancias de Juan de Herrera, decidió instituir una Academia de Matemáticas en Madrid.

La creación de la Academia se realiza en Lisboa, el 2S de diciembre de 1.582, durante el viaje de Felipe II, con motivo de la anexión de Portugal al Imperio.

El objetivo de este trabajo es el conocimiento del plan de estudios de la Academia de Matemáticas de Madrid creada por Felipe II.

1.- LOS PROFESORES DE LA ACADEMIA DE MATEMÁTICAS

El once de febrero de 1.583 salieron de Lisboa Felipe II y sus acompañantes rumbo a Madrid, donde Herrera se ocupó de poner en práctica lo acordado, buscando primero una casa en las cercanías del Real Alcázar y poniéndola en condiciones para que comenzasen en ella las clases el primero de octubre, días después de haber asistido en El Escorial a la colocación de la última piedra del Monasterio.

Se ignora cuales fueron las enseñanzas impartidas en este primer momento, pero si no hubo otros nombramientos posteriores a los conocidos de Lisboa habría que suponer que sólo Labaña con el auxilio de onderiz comenzó la enseñanza de las Matemáticas, lo que explicaría que Herrera al dar la noticia en primero de enero de 1.584 hablase de una cátedra y no de una academia.

Más tarde se incorporarían más profesores y de los datos conocidos podemos deducir que las materias explicadas y los profesores que las tuvieron a su cargo fueron:

-Matemáticas: (Labaña, Onderiz, Andrés García de Céspedes, Juan Cedillo Díaz, Julio César, Julián Firrufino y Luis Carduchi).

-Naútica: (Labaña y Juan Cedillo Díaz).

-Arte Militar: (Pedro Rodriguez Muñoz, Julián Firrufino y Cristóbal de Rojas).

-Cosmografía o Esfera: (Rocamora y Torrano, Julián Firrufino).

-Astrología: (Labaña).

-Mecánica: (Juan Angel).

2.- LoS ALUMNOS DE LA ACADEMIA DE MATEMÁTICAS

Los alumnos eran cortesanos distinguidos debido a la influencia ejercida en todos los tiempos por la conducta de los monarcas. Lo mismo que las damas de la Reina Católica años antes estudiaban latín como ella, ahora las aficciones de Felipe II y su evidente interés por esta Academia, instalada junto al Real Alcázar, originaba esas aficciones desinteresadas.

No hay, en cambio, el menor indicio de que acudiesen hombres que aspirasen a tener como medio de vida uno de los quince caminos señalados por Herrera, y la presencia de Lope de Vega en las aulas no es achacable a ello, sino

a la atracción que sobre su espíritu inquieto y fantástico provocaba en especial la Astrología.

Lope de Vega habla de su profesor Labaña en su obra. Como ejemplo veremos el siguiente párrafo de La Dorotea:

"Esto estudié en mi tierna edad del doctísimo portugués Juan Bautista Labaña y sólo tal vez juzgo por curiosidad".

3.- ENSEÑANZAS DE LA ACADEMIA DE MATEMÁTICAS

En la gran Bibliotheque Mazarine de París y con la signatura 30.383, se conserva un volumen que contiene dos obras de Juan de Herrera: "Sumario y breve declaración de los diseños y estampas de la Fábrica de San Lorenzo el Real del Escorial", e "Institución de la Academia Real Mathematica, en Castellano, que la Magestad del Rey Don Phelippe II N.S. mando fundar en su Corte".

Juan de Herrera hace unas consideraciones previas sobre el pésimo estado del conocimiento de las ciencias matemáticas en España, una disertación doctrinal sobre la importancia de las mismas, una enumeración de las quince especialidades que se cursarían y unas peticiones finales al Rey sobre la validez de estos estudios.

Lo que podía considerarse plan de estudios pretende abarcar la formación profesional de lo que hoy se consideraría quince carreras tan diferentes entre sí que van desde arquitectos e ingenieros hasta músicos y pintores. Según se afirma en el documento serían las siguientes:

Aritméticos teóricos y prácticos, para que puedan determinar las dudas y cuestiones escondidas que se ofrecen en todas las ciencias y artes.

Geómetras diestros en el medir todo género de superficies, cuerpos, campos y tierras.

Músicos expertos en aritmética, sin la cual desconocerán las consonancias musicales y la Rítmica.

Cosmógrafos encargados de situar las tierras y describir las provincias y regiones.

Pilotos diestros y cursados en navegaciones que sepan guiar con seguridad las flotas y poderosas armadas.

Arquitectos y fortificadores para que con fábricas magníficas, y edificios públicos y particulares ennoblezcan las ciudades, y las fortifiquen y defiendan de los enemigos.

Ingenieros y maquinistas, entendidos en el arte de los pesos y en todo género de Machinas.

Artilleros y maestros de instrumentos y aparatos bélicos.

Fontaneros y niveladores de las aguas para los aguaductos y regadíos.

Horologiógrafos que tratan de relojes solares.

Perspectivos que sean afamados y con fundamentos para doctrinar a pintores y escultores.

Juan de Herrera estimó, como Sócrates, que los Mathemáticos son aptos para todas las otras sciencias y artes.

Juan de Herrera estableció los libros que deberían conocerse o leerse paa cada uno de los especialistas, libros que expondremos en el párrafo siguiente.

Además de las clases teóricas, en diversas ramas (Mecánica, Cosmografía, etc.) se indica que habrían de manejarse diversos aparatos y máquinas y ello concuerda con las actividades de Herrera, Labaña y otros como inventores de instrumentos científicos. La descripción de los laboratorios y talleres de la Academia, debido a Carduchi, acredita hasta qué punto se valoraron estas enseñanzas prácticas. Por fortuna, lo único que ha llegado a nuestros días es una serie de valiosos aparatos de esta colección, que pasaron a los Reales Estudios y por las sucesivas transformaciones de sus locales llegaron a ser propiedad del Instituto de San Isidro, que en fecha reciente ha tenido que entregarlos al Ministerio de Educación para que se exhiban en el Museo de la Ciencia.

4.- ESPECIALISTAS DE LA ACADEMIA

Aritméticos

Aconsejaba a los que quisieran saber esta disciplina conocer los primeros nueve libros de Euclides. También el estudio de Elementa Arithmética de Jordano Memorario, la Aritmética de Boecio y la Aritmética de Frater Lucas.

Y para los que quieran estudiar Álgebra deben conocer el Décimo libro de Euclides, el de Algebra en Arithmética del Doctor Pedro Núñez, la Aritmética íntegra de Stifelio y el Algebram de Peletier.

Geómetras y mensuradores

El Geómetra ha de saber: "Los esféricos" de Teodosio, "Las Secciones cónicas" de Apolonio Pergeo, la obra de "De sphaera et cilindro" de Arquímedes. Para ejercitar su oficio deberá leer los seis primeros libros de Euclides y para la estereotomía el undécimo y duodécimo.

Mecánicos

Según Juan de Herrera el que quiera estudiar Mecánica, madre y maestra de la vida, por los muchos provechos que de ella resultan, debería saber los siete primeros libros de Euclides y el séptimo, undécimo y duodécimo del mismo autor. También los siguientes: Equiponderantes de Arquímedes, Centro gravitatis de Comandino, Liber de Ponderibus de Jordano Nemorario y las Mecánicas de Aristóteles.

Astrólogos

La inquietud intelectual de Juan de Herrera le condujo a concebir una visión renacentista del mundo, en el que ésta era para él a la vez mágico y científico. En aquel mundo la astrología y la astronomía todavía permanecían unidas.

Herrera aconseja a los astrólogos las siguientes obras: los quince libros de Euclides y su Perspectiva y Especularia, este último en la traducción, entonces manuscrita, de onderiz, donde presenta la proyección cónica y la reflexión en los espejos planos y esféricos; los Triángulos planos y esféricos de Monteregio y los de Menelao traducidos por Maurolico; el Almagesto de Tolomeo, las Tablas astronómicas del rey Alfonso el Sabio y también las de Abraham Zacuto, contenidas en su Almanach perpetuum, y finalmente aconseja usar los instrumentos astronómicos.

Horologiógrafos o Gnomónicos

Consideró Juan de Herrera que quien pretendiera saber la Gnomónica o Horologiógrafia, deberá entender los seis primeros libros de Euclides y el undécimo y duodécimo, además de los Esféricos de Teodosio, las Cónicas de Apolonio, la Gnomónica de Cristobal Clavio, que es el más completo texto publicado sobre la construcción de relojes astronómicos, la Analemmate de Tolomeo comentado por Comandino, en cuyo segundo libro enseña la construcción de relojes solares y la traducción por Maurolico de los Esféricos de Teodosio, además de entender muy bien la perspectiva.

Cosmógrafos

El Cosmógrafo, según Herrera, deberá entender de la Esfera, de la Teórica de planetas y de Eclipses. Por eso manejará la Geografía de Tolomeo.

Pilotos

Juan de Herrera había inventado un instrumento para determinar las longitudes en las navegaciones de Este a Oeste que mereció el privilegio concedido por Felipe II. Juan de Herrera escribió: *"el perfecto piloto deue de saber la sphaera, entender la carta de marear y saber en ella situar y poner la tierra "*. En atención a ello dispuso que se estudiaran la Geografía de Tolomeo.

Perspectivistas

En opinión de Juan de Herrera los que quisieren ser perfectos en esta facultad entenderán los seis primeros libros de Euclides además del undécimo y duodécimo; la Perspectiva de Tolomeo y la Perspectiva práctica de Barbaro.

Músicos

Los estudiantes deberían conocer lo que hay escrito de música por los autores y obras siguientes: de Aristoxeno, *Harmonicas*; de Euclides, *Música*; de Tolomeo, *Harmonicarum*; de Boecio, *De Musica*; de Jordano, *Elementa Musicalia* y de Zarlino, *Institutione Harmoniche*.

Por otra parte con el conocimiento de estos textos confixmaba Herrera la importancia de las matemáticas en la composición musical, concepto importante en su época. Así Boecio expone los fundamentos matemáticos de la música con doctrinas pitagóricas y el cálculo matemático de los intervalos y las proporciones.

Arquitectos

Especifica Juan de Herrera *"el que quisiere merecer el nombre de Architecto"* deberá entender el tratado *De Architectura* compuesto por Vitruvio, y los Dieci libri de I ' *Architectura* de Leon Battista Alberti "

Estima Herrera que *el que quisiere gozar del nombre de Pintor "* deberá ser expertísimo en el Diseño y en el Colorido. En cuanto a sus conocimientos, tanto teóricos como prácticos, ha menester de las Matemáticas, Anatomía y Perspectiva.

Fortificadores

Para Herrera la fortificación es un arte. Por eso dice que: *el arte de fortificar fue antiguamente profesión propia de los Alarifes, para quienes todo su intento es defender y asegurar las fuerzas y ciudades del ímpetu del enemigo*

Los fortificadores estaban obligados a saber Arquitectura, además de conocer todo lo referente a las máquinas bélicas y a la artillería.

Niveladores

Juan de Herrera considera oficio el de Nivelador que se ocupa de nivelar las aguas, encañar las fuentes, construir acequias y conductos de aguas.

Los Niveladores deberán conocer los seis primeros libros de Euclides y el séptimo, así como el tratado "De iis quae vehuntur in aqua", de Arquímedes, así como el tratado "De iis quae vehuntur in aqua", de Arquímedes, los Hidráulicos de Herón Alejandrino y el octavo libro de Vitruvio.

Herrera dominaba este oficio, pues rectificó la nivelación de la famosa acequia de Colmenar de oreja.

Milleros

Piensa Herrera que los artilleros tienen que estudiar la misma teoría que los mecánicos, mientras que para la práctica deben saber de fundiciones y mezclas de metales, de medidas. También sabrán hacer pólvora, salitre y fuegos artificiales.

Para leer en la Academia aconseja Herrera: el tratado *Inventione* de Tartaglia, que desarrolla el movimiento y la caída de los cuerpos, el décimo libro de Vitruvio, y algunas cosas de Ateneo que suponemos pudieran encontrarse en *Las Máquinas de guerra*, tratado atribuido a él.

Ateneo, contemporáneo de Arquímedes, fue un tratadista militar y matemático, griego de la escuela de Platón.

Bibliografía

- 1) Catálogo de la exposición sobre Felipe II en San Lorenzo de El Escorial, 1.998.
- 2) Cervera Vera, Luis: "Documentos biográficos de Juan de Herrera". Real Academia de Bellas Artes de San Fernando. Madrid 1.987.

- 3) Herrera, Juan de: "Institución de la Academia Real Mathematica". Edición y estudios preliminares de José Simón Díaz y Luis Cervera Vera. Instituto de Estudios Madrileños. Madrid 1.998.
- 4) Menéndez Pelayo, Marcelino: "La Ciencia Española". Edición nacional. Tomo I. Santander. C.S.I.C. 1.953.
- 5) Pérez Pastor, Cristóbal: "Bibliografía madrileña". Madrid 1.906.
- 6) Rey Pastor, Julio: "Los matemáticos españoles del siglo XVI". Madrid. Junta de Investigaciones histórico-bibliográficas. 1.934.
- 7) Romo, Concepción. "Felipe II, defensor e impulsor de la Astronomía". "Gaceta del Coliseo, nº 160. Abril 1.993. San Lorenzo de El Escorial.
- 8) Vega Carpio, Lope de. "La Dorotea". Edición de José Manuel Blecha. Madrid. Revista de occidente. 1.953.
- 9) Vera, Francisco. "Historia de la Matemática en España". Madrid 1.931.

Accessibility of solutions of equations on Banach spaces by a Newton-like methods and applications

Ioannis K. Argyros

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

Abstract

We provide sufficient conditions for the convergence of Newton-like methods to a locally unique solution of an equation on a Banach space. We use the concept of the degree of logarithmic convexity in connection with the fixed point theorem to extend the region of convergence given so far for these methods. In the case of quadratic equations we find a ring that contains accessibility points for Newton's method lying outside the sphere of convergence given by the Newton-Kantorovich Theorem. Our results extend the region of accessibility of solutions by Newton's method for some quadratic integral equations appearing in radiative transfer [1], [5], [9].

1. Introduction

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

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

where F is an operator defined on a closed convex domain D of a Banach space E_1 with values in a Banach space E_2 . We use Newton-like methods of the form

$$x_{n+1} = x_n - A(x_n)^{-1}F(x_n), \quad (n \geq 0)(x_0 \in D) \quad (2)$$

to generate an iteration $\{x_n\}(n \geq 0)$ converging to x^* . Here $A(x) \in L(E_1, E_2)(x \in D)$ which is the space of bounded linear operators from E_1 into E_2 . For $A(x) = F'(x)(x \in D)$ we obtain Newton's method [3], [4], [8]. Several other choices for A are also possible [4], [8]. We define the operator $P : D \subseteq E_1 \rightarrow E_2$ by

$$P(x) = x - A(x)^{-1}F(x), \quad (3)$$

in which case (2) can also be written as

$$x_{n+1} = P(x_n) \quad (n \geq 0)(x_0 \in D). \quad (4)$$

Sufficient conditions for convergence of iteration $\{x_n\} (n \geq 0)$ to x^* have been given by several authors (see, for example, [4], [8] and the references there).

A solution x^* of equation (1) is said to be accessible from x_0 by Newton-like method (2) if

$$x^* = \lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \lim_{n \rightarrow \infty} P^n(x_0). \quad (5)$$

The region of accessibility of x^* by method (2) is defined to be the set of all x_0 such that (5) is true.

Let us define operator $L_F \in L(E_1, L_2)$ by

$$L_F(x) = P'(x) \quad (x \in D). \quad (6)$$

This operator is the degree of logarithmic convexity of F in x and is a measure of convexity of the function. It was used in [6], [7] in the special case when $A(x) = F'(x) (x \in D)$. These convergence results were used to find starting points x_0 lying outside previously found convergence regions, for which (2) converges to x^* in this case. However this was done only for scalar as well as systems of equations when $E_1 = E_2 = R$. This is because for convergence we need to show $\|L_F(x)\| \leq c < 1$, and this is a very difficult problem in general.

Here we provide sufficient convergent conditions for our method (2) to a locally unique solution x^* of equation (1). Our results reduce to the corresponding ones in [6]. Moreover we show how to compute c for quadratic equations on E_1 . We also suggest how to compute c for polynomial equations on E_1 of degree $k \in N$.

Finally we show how to apply our results to solve quadratic integral equations appearing in radiative transfer [1], [3], [4], [5], [8], [9].

2. Convergence Analysis

Using contraction mapping techniques we obtain the semilocal convergence results:

Theorem 1. Let $F : D \subseteq E_1 \rightarrow E_2$ be Fréchet-differentiable on a closed convex domain D , $A(x) \in L(E_1, E_2)$ for all $x \in D$. Assume:

- (a) linear operator $\Gamma = A(x)^{-1}$ exists and is differentiable for all $x \in D$;
- (b) linear operator $L_F(x)$ exists on D and

$$\|L_F(x)\| \leq c < 1 \quad \text{for all } x \in D; \quad (7)$$

- (c) for $x_0 \in D$, $r^* \geq \frac{\|x_0 - P(x_0)\|}{1-c}$, $U(x_0, r^*) = \{x \in E_1 \mid \|x - x_0\| \leq r^*\} \subseteq D$.

Then Newton-like iteration $\{x_n\} (n \geq 0)$ generates by (2) is well defined, remains in $U(x_0, r^*)$ for all $n \geq 0$ and converges to a fixed point x^* of P in $U(x_0, r^*)$ which is unique

in D . Moreover the following error bounds are true for all $n \geq 0$

$$\|x_n - x^*\| \leq c^n r^*. \quad (8)$$

Proof. Newton-like iteration $\{x_n\} (n \geq 0)$ is well defined on D for all $x_0 \in D$ since linear operator $A(x)$ is invertible on D . Using induction on $n \geq 0$ we can show

$$x_n \in U(x_0, r^*) \quad \text{and} \quad \|x_n - x_0\| \leq (1 - c^n) r^* < r^*. \quad (9)$$

For $n = 1$ and hypothesis (c) we have $\|x_1 - x_0\| \leq (1 - c) r^* < r^*$, which shows (9) in this case. Assume that (9) is true for all positive integers smaller or equal to n . Then we must show

$$x_{n+1} \in U(x_0, r^*) \quad \text{and} \quad \|x_{n+1} - x_0\| \leq (1 - c^{n+1}) r^* < r^*.$$

By hypothesis (b) and (4) we get

$$\begin{aligned} \|x_{n+1} - x_n\| &= \|P(x_n) - P(x_{n-1})\| \leq \sup_{z \in [x_{n-1}, x_n]} \|P'(z)\| \|x_n - x_{n-1}\| \\ &\leq c \|x_n - x_{n-1}\| \leq \dots \leq c^n \|x_1 - x_0\| = c^n (1 - c) r^*, \end{aligned} \quad (10)$$

and

$$\|x_{n+1} - x_0\| \leq \|x_{n+1} - x_n\| + \|x_n - x_0\| \leq c^n (1 - c) r^* + (1 - c^n) r^* = (1 - c^{n+1}) r^* < r^*,$$

which completes the induction. Moreover by (10) we obtain, for $n, m \in \mathbb{N}$

$$\|x_{n+m} - x_n\| \leq (1 - c^m) c^n r^*. \quad (11)$$

Estimate (11) shows that $\{x_n\} (n \geq 0)$ is a Cauchy sequence in a Banach space E_2 and as such it converges to a limit $x^* \in U(x_0, r^*)$, since $U(x_0, r^*)$ is a closed set. By taking the limit as $n \rightarrow \infty$ in (4) and using the continuity of F and $A(x)$ we deduce $P(x^*) = x^*$. To show uniqueness, let $y^* \in D$ with $P(y^*) = y^*$. Then we can get

$$\|x^* - y^*\| = \|P(x^*) - P(y^*)\| \leq \sup_{z \in [x^*, y^*]} \|P'(z)\| \|x^* - y^*\| \leq c \|x^* - y^*\|$$

which implies that $x^* = y^*$ (since $c \in [0, 1)$). Finally, letting $n \rightarrow \infty$ in (11) we obtain (8), that completes the proof of the Theorem.

Following [4], [6], [7], the region of accessibility to x^* is extended to a closed ball around x_0 as the following result indicates:

Theorem 2. Consider the iteration $y_{n+1} = P(y_n)$ for $y_0 \in U(x_0, r^*)$ under the hypotheses of Theorem 1. Then iteration $\{y_n\} (n \geq 0)$ is well defined remains in $U(x_0, r^*)$ and converges to a unique fixed point x^* of P in $U(x_0, r^*)$. Moreover the following error bounds are true for all $n \geq 0$:

$$\|y_n - x^*\| \leq \frac{c^n}{1 - c} \|y_1 - y_0\| \quad \text{and} \quad \|y_n - x^*\| \leq c^n \|x^* - y_0\|.$$

Proof. The result follows immediately by the contraction mapping principle [4], [8], provided we show that operator P maps $U(x_0, r^*)$ into itself. Indeed let $x \in U(x_0, r^*)$, then we obtain

$$\|x_1 - P(x)\| = \|P(x_0) - P(x)\| \leq c\|x_0 - x\| \leq cr^*,$$

that completes the proof of the Theorem.

Corollary. If $\|v_0 - x_0\| \leq r_0 - r^*$ under the hypotheses of Theorem 2, Newton-like iteration $\{x_n\} (n \geq 0)$ converges to x^* for any starting point in $U(x_0, r^*)$

In terms of the degree of logarithmic convexity we have the following result concerning the convergence of Newton-like method (2).

Theorem 3. Assume that hypothesis (b) of Theorem 1 holds on $D = U(v_0, r_0)$. If $\|A(v_0)^{-1}F(v_0)\| \leq (1-c)r_0$, Newton-like method $\{x_n\} (n \geq 0)$ generated by (2) converges to the unique solution x^* of equation $F(x) = 0$ in D for any $x_0 \in D$.

Proof. We note that a fixed point P is a solution of equation $F(x) = 0$. The result now follows immediately from the proofs of the previous Theorems.

Remark. For $A(x) = F'(x)$ (x in D) Theorem 1, 2, Corollary, Theorem 3 reduce respectively to Theorems 2.1, 2.2, Corollary, Theorem 2.4 in [6].

3. Applications to Quadratic Equations

The verification of condition (b) of Theorem 1 is a very hard problem in general. In [6], [7] and the references there the authors verified this condition for scalar as well as systems of real or complex equations. Here we suggest a possible extension of our results in the case of quadratic equations of the form

$$F(x) = y + B(x, x) - x \quad (12)$$

where B is a bounded symmetric bilinear operator on $D \subseteq E_1$ and $y \in E_1$ is fixed. Hence in the case of F given by (12) we obtain from (6) for $A(x) = F'(x)$ ($x \in D$)

$$L_F(x)(z) = 2B(x)B(x)(z)[-x + y + B(x, x)] \quad (13)$$

where $B(x) = (2B(x) - I)$ and $B(x)^{-1} = [(2B(x) - I)]^{-1}$

Let $x_0 \in D$ be such that $[F'(x_0)]^{-1} = B(x_0)^{-1}$ exists and set $b \geq \|B(x_0)^{-1}B\| \neq 0$. Let $r \in [0, \frac{1}{2b}]$, and assume $U(x_0, r) \subseteq D$. Then for $x \in U(x_0, r)$ we have

$$B(x) = B(x_0)[I + 2B(x_0)^{-1}B(x - x_0)], \quad (14)$$

and

$$\|2B(x_0)^{-1}B(x - x_0)\| \leq 2\|B(x_0)^{-1}B\|\|x - x_0\| \leq 2br < 1. \quad (15)$$

It follows from the Banach Lemma on invertible operators [4], [8] that $F'(x) = B(x)$ is invertible on $U(x_0, r)$ and

$$\|B(x)^{-1}B(x_0)\| \leq (1 - 2br)^{-1}. \quad (16)$$

Moreover we have by (12)

$$\begin{aligned} B(x_0)^{-1}F(x) &= B(x_0)^{-1}[(x_0 - x) + (y - x_0) + B\{(x - x_0) + x_0, (x - x_0) + x_0\}] \\ &= B(x_0)^{-1}B(x_0)(x - x_0) + [B(x_0)^{-1}B](x - x_0, x - x_0) \\ &\quad + B(x_0)^{-1}[y - x_0 + B(x_0, x_0)] \end{aligned}$$

By taking norms, using the triangle inequality and (4) we get

$$\|B(x_0)^{-1}F(x)\| \leq \|x - x_0\| + \|B(x_0)^{-1}B\|\|x - x_0\|^2 + \|x_0 - P(x_0)\| \leq r + br^2 + \|x_0 - P(x_0)\| \quad (17)$$

It follows from (13), (16) and (17) that

$$\|L_F(x)\| \leq c(r), \quad r \in \left[0, \frac{1}{2b}\right), \quad (18)$$

where

$$c(r) = \frac{2b}{(1 - 2br)^2}(r + \delta + br^2), \quad \delta \geq \|x_0 - P(x_0)\|. \quad (19)$$

Define the scalar function h on $[0, +\infty)$ by

$$h(r) = c_1 r^2 + c_2 r + c_3 \quad (20) \quad \text{where} \quad c_1 = -2b^2, c_2 = 6br, c_3 = 2b\delta - 1.$$

It is simple algebra to show that $c(r) \in [0, 1)$ if

$$h(r) < 0 \quad \text{and} \quad r \in \left[0, \frac{1}{2b}\right). \quad (21)$$

It can easily be seen that (21) is true if

$$q = 2b\delta \leq q < 1, \quad (22) \quad \text{and} \quad r \in [0, a), \quad \text{where} \quad a = \frac{3 - \sqrt{7 + 2q}}{2b}. \quad (23)$$

Note that estimate (22) is the Newton-Kantorovich hypothesis for equation (12) and a is the smallest zero of the scalar equation $h(r) = 0$ where h is given by (20) [4], [8].

Hence we arrive at:

Theorem 4. Let $F : U^0(x_0, a) \subseteq E_1 \rightarrow E_2$ be given by (12), and $A(x) = F'(x)(x \in D)$ in (2). Assume that the Newton-Kantorovich hypothesis (22) is true for some $x_0 \in U^0(x_0, a)$ at which $F'(x_0)$ is invertible. Then (7) is true for all $r \in [0, a)$. Moreover if there exists a minimum nonnegative number $r^* \in [0, a)$ satisfying the inequality

$$r \geq \frac{\delta}{1 - c(r)}. \quad (24)$$

then the conclusions of Theorem 1 for equation (12) and iteration (2) are true.

Proof. It follows immediately from the above discussion, the proof of Theorem 1 and the observation that (24) is true if $g(r^*) \geq 0$ where g is a function defined on $[0, +\infty)$ given by

$$g(r) = 2b^2r^3 - 2b(3+q)r^2 + (1+q)r - \delta, \quad (25)$$

Remark 2. Descarte's rule of signs the equation $g(r) = 0$ has three positive zeros or one. Let s denote the smallest such zero in either case. We note that equation (25) can have zeros in $[0, a)$ even if $g(a) < 0$. However it is simple algebra to check that $g(a) < 0$. Hence we can set $r^* = s$ in this case.

Remark 3. Another approach will be to define the function g_1 on $[0, +\infty)$ by $g_1(r) = -2b(3+q)r^2 + (1+q)r - \delta$. We note that by (25) $g_1(r) \geq 0$ for all $r \in [0, +\infty)$. The discriminant of this quadratic polynomial is nonnegative if $q \in [0, \frac{2\sqrt{7}-5}{3}]$. Let $t_1 \leq t_2$ be the real zeros of the equation $g_1(r) = 0$. Then we easily deduce $t_1 < a$. Hence in this case set $r^* = t_1$ in Theorem 4.

Te Newton-Kantorovich Theorem [4], [8] for equation (12) asserts that if hypothesis (22) is satisfied then $x^* \in U(x_0, r_k)$ where $r_k = \frac{1-\sqrt{1-q}}{b}$. We easily show:

(i) if $q \in [0, \frac{2\sqrt{13}-5}{9})$ then $r_k < a$;

(ii) if $q \in [0, \frac{2\sqrt{13}-5}{9}]$ then $r_k \geq a$;

(iii) $g(r_k) \leq 0$ and $g(r_k) = 0$ if $q = 0$ ($r_k = 0$ in this case).

At the end of this study we provide an example where $x^* \in U(x_0, r_k) \subseteq U(x_0, t_1)$.

Remark 4. Theorem 4 is a crude application of Theorem 1. In practice one hopes that (7) will be satisfied in cases that do not imply the Newton-Kantorovich hypothesis (22). Examples where Newton's method converges but (22) is violated were given in [6], [7] for scalar or systems of real equations and in [1], [3], [4] for quadratic integral equations on various Banach spaces. See also the example that follows.

Remark 5. Concluding we note that both Newton-Kantorovich and Theorem 4 apply if condition (22) is satisfied. However the balls centered at the same point x_0 that contain the solution x^* are not of the same radius.

Let us consider the ring $U = U(x_0, r^*) - U(x_0, r_k) \neq \emptyset$ then there exists a starting point $w_0 \notin U(x_0, r_k)$ such that Newton's method converges. However the Newton-Kantorovich Theorem [4], [8] does not guarantee convergence in this case. Hence there exists a region of accessibility for the convergence of Newton's method that is missed by the Newton-Kantorovich Theorem [1], [3], [4], [5], [8], [9], [10]. We confront such a case in the example

that follows.

Example. Special cases of (12) are quadratic integral equations of the form

$$F(x)(s) = y(s) + \lambda x(s) \int_0^1 k(s, t)x(t)dt - x(s) = 0 \quad (26)$$

in the space $E_2 = E_1 = C[0, 1]$ of all functions continuous on the interval $[0, 1]$ with norm

$$\|x\| = \max_{s \in [0, 1]} |x(s)|.$$

Here we assume that λ is a number called the "albedo" for scattering and the kernel $k(s, t)$ is a continuous function of two variables $s, t \in [0, 1]$ satisfying

$$0 \leq k(s, t) \leq 1, \quad k(0, 0) = 1 \quad \text{and} \quad k(s, t) + k(t, s) = 1, \quad s, t \in (0, 1).$$

The function $y(s)$ is a given continuous function defined on $[0, 1]$, and $x(s)$ is the unknown function sought in $[0, 1]$.

Equations of this type are closely related with the works of S. Chandrasekhar [5], (Nobel prize of Physics 1983), and arise in the theories of radiative transfer, neutron transport and in the kinetic theory of gases in connection with the problem of determination of the angular distribution of the radiant flux emerging from a plane radiation field [1], [3], [4], [5], [9].

To apply Theorem 4 we need to compute b and δ initially, For example choose $K(s, t) = \frac{s}{s+t}$, $K(0, 0) = 1$, $s, t \in (0, 1]$, and define

$$B(x, y) = \frac{1}{2} \lambda \left[x(s) \int_0^1 \frac{s}{s+t} y(t) dt + y(s) \int_0^1 \frac{s}{s+t} x(t) dt \right].$$

Then B is a symmetric, bounded, bilinear operator on E_1 with

$$B(x, x)(s) = \lambda x(s) \int_0^1 \frac{s}{s+t} x(t) dt \quad (27)$$

and

$$\|B\| = |\lambda| \max_{s, t \in [0, 1]} \left| \int_0^1 \frac{s}{s+t} dt \right| = |\lambda| \ln 2. \quad (28)$$

Note that the choice of B given by (27) is indeed a special case of equation (12). The values of b, δ for various choices of λ have been given in [1], [3], [4], [5], [9] and the references there.

Choose as an example $x_0(s) = y(s) = 1$ for all $s \in [0, 1]$, $\lambda = 2$, then from (22), (23), Remark 3, (30), we obtain

$$\|F'(1)^{-1}\| \leq 1.3836213, \quad a = .8513131, \quad b = \delta \leq .1918106,$$

$$q = .0735826, \quad r_k = .1954752, \quad t_1 = .242025 = r^* \quad \text{and} \quad c(r^*) = .2074761.$$

All hypotheses of Theorem 4 are satisfied for $r^* = t_1$ and $U(x_0, r_k) \subseteq U(x_0, t_1)$ (also see Remark 5).

Finally the results of Theorem 4 can be extended to include polynomial operator equations of degree $k \in N$ given by

$$F(x) = M_0 + M_1(x) + M_2(x, x) + \dots + M_k(x, x, \dots, x) - x = 0,$$

where M_i is a bounded, symmetric i -linear operator ($i = 1, 2, \dots, k$) and $M_0 \in E_1$ is fixed [1], [2], [4], [8], [9]. For the computational details in deriving the crucial functions $c(r)$ and $h(r)$ in this case we refer the reader especially to [2].

Conclusion

We provide sufficient conditions for the convergence of Newton-like methods to a locally unique solution of an equation on a Banach space. We use the concept of the degree of logarithmic convexity in connection with the fixed point theorem to extend the region of convergence given so far for these methods. In the case of quadratic equations we find a ring that contains accessibility points for Newton's method lying outside the sphere of convergence given by the Newton-Kantorovich Theorem. Some applications of our results to the solution of quadratic integral equations appearing in radiative transfer in connection with the problem of determination of angular distribution of the radiant flux emerging from a plane radiation field are given. Relevant work can be found especially in [1], [4], [5], [9], [10].

References

- [1] Argyros, I.K. (1985): *Quadratic equations and applications to Chandrasekhar's and related equations*. Austral. Math. Soc. **32**, 275-292.
- [2] Argyros, I.K. (1987): *On the approximation of some nonlinear equations*. Aequationes Mathematicae. **32**, 87-95.
- [3] Argyros, I.K. (1988): *On a class of nonlinear equations arising in neutron transport*. Aequationes Mathematicae. **36**, 99-111.
- [4] Argyros, I.K. and Szidarovszky, F.: *The Theory and Applications of Iteration Methods*, C.R.C. Press, Inc., Boca Raton, Florida, 1993.
- [5] Chandrasekhar, S.: *Radiative Transfer*. Dover Publ., New York, 1960
- [6] Gutiérrez, J.M., Hernández, M.A. and Salanova, M.A. (1995): *Accessibility of solutions by Newton's method*. Intern. J. Computer. Math. vol. **57**, 239-247.

- [7] Hernández, M.A. (1991): *A note on Halley's method*. Numer. Math. 54, 273-276.
- [8] Kantorovich, L.V. and Akilov, G.P.: *Functional Analysis*. Pergamon Press, New York, 1982.
- [9] Ruch, D.K. (1985): *On uniformly contractive systems and quadratic equations in Banach spaces*. Bull Austral. Math. Soc. 32, 275-292.
- [10] Szidarovszky, F. and Palusinski, O. (1994): *A special matrix equation and its applications in microelectronics*. Appl. Math. Comp. 64, 115-119.

Abstract

In this study we use a Stirling-like method to approximate a locally unique fixed point of a nonlinear equation on a Banach space. We use the concept of α -strongly convexity to find a ball containing the solution. We show that our ball contains convergence balls found in earlier results. Consequently, there exist infinitely many new starting points from which the fixed point can be accessed.

1. Introduction

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

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

where F is a nonlinear operator defined on a closed convex subset D of a Banach space E with values on itself.

We define the functions

$$\mu(x) = [I - F'(P(x))]^{-1} \quad \text{and} \quad \nu(x) = x - F(x),$$

and we propose the Stirling-like method

$$x_{n+1} = x_n - \mu(x_n)\nu(x_n) \quad (n \geq 0). \quad (2)$$

Here $P : D \subseteq E \rightarrow E$ is a continuous mapping and $F'(x)$ denotes the Fréchet-derivative of operator F [3], [5]. Special cases of (2), namely Newton's method $\{P(x_n) = x_n, (n \geq 0)\}$, the modified form of Newton's method $\{P(x_n) = x_n, (n \geq 0)\}$, the ordinary Stirling method $\{P(x_n) = F(x_n), (n \geq 0)\}$, have been studied extensively [1]-[6]. Stirling's method can be viewed as a combination of the method of successive substitutions and Newton's method. In terms of the computational effort, Stirling and Newton's method require the same computational cost.

Accessibility of solutions of equations on Banach spaces by a Stirling-like method

Ioannis K. Argyros

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

Abstract

In this study we use a Stirling-like method to approximate a locally unique fixed point of a nonlinear equation on a Banach space. We use the concept of logarithmic convexity to find a ball containing the solution. We show that our ball includes convergence balls found in earlier results. Consequently, there exist infinitely many new starting points from which the fixed point can be accessed.

1. Introduction

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

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

where F is a nonlinear operator defined on a closed convex subset D of a Banach space E with values on itself.

We define the functions

$$\mu(x) = [I - F'(P(x))]^{-1}, \quad \nu(x) = x - F(x),$$

and we propose the Stirling-like method

$$x_{n+1} = x_n - \mu(x_n)\nu(x_n) \quad (n \geq 0). \quad (2)$$

Here $P : D \subseteq E \rightarrow E$ is a continuous operator and $F'(x)$ denotes the Fréchet-derivative of operator F [3], [5]. Special cases of (2), namely Newton's method $\{P(x_n) = x_n \ (n \geq 0)\}$, the modified form of Newton's method $\{P(x_n) = x_0 \ (n \geq 0)\}$ the ordinary Stirling method $\{P(x_n) = F(x_n) \ (n \geq 0)\}$, have been studied extensively [1]-[6]. Stirling's method can be viewed as a combination of the method of successive substitutions and Newton's method. In terms of the computational effort, Stirling and Newton's method require the same computational cost.

In this study we provide sufficient conditions for the convergence of method (2) to x^* . Moreover we find a ball centered at a certain point $x_0 \in D$ including same center convergence balls found in earlier works (see [2], [3], [6], and the reference there). Consequently, we find a ring containing infinitely many new starting points from which x^* can be accessed via method (2).

To achieve this goal we define the operator $G : D \rightarrow E$ by

$$G(x) = x - \mu(x)\nu(x). \quad (3)$$

We then use the degree of logarithmic convexity of G which is defined to be Fréchet-derivative G' of G , [3], [4], [5].

Finally, we complete our study with an example where our results compare favorably with earlier ones.

2. Convergence Analysis

Let $a \in [0, 1]$, $b \geq 0$, and $x_0 \in D$ be given. Define the real function g on $[0, +\infty)$, by

$$g(r) = b(1+a)r^2 - [(1-a)^2 - b\|\nu(x_0)\|]r + (1-a)\|\nu(x_0)\|, \quad (4)$$

and set

$$c = b\|\nu(x_0)\| \quad (5)$$

It can easily be seen, that if

$$c < [\sqrt{a^2 + (1-a)^2} - a]^2 = d, \quad (6)$$

then equation $g(r) = 0$ has two nonnegative zeros denoted by r_1 , and r_2 , with $r_1 \leq r_2$.

Define also

$$r_3 = \frac{(1-a)^2 - b\|\nu(x_0)\|}{b(1+a)}. \quad (7)$$

Finally, set:

$$I = [r_1, r_3]. \quad (8)$$

We now state and prove the main semilocal convergence theorem for method (2).

Theorem 1. Let F, P , be continuous operators defined on a closed convex subset D of a Banach space E with values on itself. For $a \in [0, 1]$, $b \geq 0$, and $x_0 \in D$ be fixed, assume:

(a) F is twice continuously Fréchet-differentiable on D , and

$$\|F'(x) - F'(y)\| \leq b\|x - y\|, \quad (9) \quad \|F'(x)\| \leq a < 1, \quad (10) \quad \text{for all } x, y \in D.$$

- (b) $U(x_0, r) = \{x \in E_1 \mid \|x - x_0\| \leq r\} \subseteq D$ for any $r \in I$, where I is given by (8).
 (c) $c < d$, where c, d are given by (5), and (6), respectively.
 (d) P is continuously Fréchet-differentiable on D , and

$$\|P'(x)\| \leq a, \quad (11) \quad P(x) \in U(x_0, r), \quad (12)$$

$$\|x - P(x)\| \leq \|\nu(x)\|, \quad (13) \quad \text{for all } x \in U(x_0, r).$$

Then, the following hold:

(i)
$$\|G'(x)\| \leq \frac{b}{(1-a)^2} \|\nu(x)\| \leq h(r) < 1, \quad (14)$$

where

$$h(r) = [(1+a)r + \|\nu(x_0)\|] \frac{b}{(1-a)^2} \quad (15) \quad \text{for all } r \in I.$$

(ii) Iteration $\{x_n\} (n \geq 0)$, generated by (2) is well defined, remains in $U(x_0, r) (r \in I)$ for all $n \geq 0$ and converges to a fixed point x^* of G in $U(x_0, r_1)$ which is unique in $U(x_0, r_4)$, where $r_4 \in [r_1, r_5]$ and $r_5 = \min\{r_2, r_3\}$.

Moreover, the following estimates hold for all $n \leq 0$:

$$\|x_n - x^*\| \leq h^n(r)r, \quad r \in I \quad (16)$$

$$\|x_{n+1} - x^*\| \leq \frac{b}{1-a} [\|x_n - P(x_n)\| + \|P(x_n) - x^*\|] \|x_n - x^*\| \leq \frac{b(1+2a)}{2(1-a)} \|x_n - x^*\|^2 \quad (17)$$

Proof:

(i) By differentiating (3), we obtain in turn for $x \in D$

$$\begin{aligned} G'(x) &= I - \mu'(x)\nu(x) - \mu(x)\nu'(x) = I + \mu(x)F''\{P(x)\}P'(x)\mu\nu(x) - \mu(x)[I - F'(x)] \\ &= \mu(x)[\mu^{-1}(x) + F''\{P(x)\}P'(x)\mu(x)\nu(x) - I + F'(x)] \\ &= \mu(x)[F'(x) - F'\{P(x)\} + F''\{P(x)\}P'(x)\mu(x)\nu(x)] \end{aligned} \quad (18)$$

Using (9)-(13) and the Banach lemma on invertible operators [5] we obtain from (18)

$$\|G'(x)\| \leq \frac{b}{(1-a)^2} \|\nu(x)\| \quad (19)$$

In particular for $x \in U(x_0, r)$, (19), the choice of $r \in I$, and the estimate

$$\|\nu(x)\| = \|(x - x_0) + \nu(x_0) + [F(x_0) - F(x)]\| \leq r + \|\nu(x_0)\| + ar,$$

we obtain (14).

(ii) It follows from (4) that

$$r \geq \frac{\|x_0 - G(x_0)\|}{1 - h(r)}, \quad r \in I. \quad (20)$$

Hence we can get

$$\|x_1 - x_0\| = [1 - h(r)]r \leq r, \quad r \in I$$

which shows $x_1 \in U(x_0, r)$ and (16) for $n = 1$. Assume that, for $k = 1, 2, \dots, n$, we have

$$x_k \in U(x_0, r) \quad \|x_k - x_0\| \leq [1 - h^k(r)]r \leq r, \quad r \in I \quad (21)$$

Using (2) and part (i), we obtain in turn

$$\begin{aligned} \|x_{n+1} - x_n\| &= \|G(x_n) - G(x_{n-1})\| \leq \sup_{y \in [x_{n-1}, x_n]} \|G'(y)\| \|x_n - x_{n-1}\| \\ &\leq h(r) \|x_n - x_{n-1}\|, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\|x_{n+1} - x_n\| \leq h(r) \|x_n - x_{n-1}\| \leq \dots \leq h^n(r) \|x_1 - x_0\| = [1 - h(r)]h^n(r)r,$$

and for $r \in I$

$$\|x_{n+1} - x_0\| \leq \|x_{n+1} - x_n\| + \|x_n - x_0\| \leq [1 - h(r)]h^n(r)r + [1 - h^n(r)]r = [1 - h^{n+1}(r)]r \leq r,$$

That is, we showed (16) for all $k \in N$. Moreover by (22), we have for $n, m \in N$

$$\|x_{n+m} - x_n\| \leq [1 - h^m(r)]h^n(r)r. \quad (23)$$

Estimate (23) shows that $\{x_n\} (n \geq 0)$ is a Cauchy sequence in a Banach space E , and as such it converges to some $x^* \in U(x_0, r)$ (since $U(x_0, r)$ is a closed set). Because of the continuity of F, F', P and (2), we obtain $P(x^*) = x^*, G(x^*) = x^*$ and $F(x^*) = x^*$.

To show uniqueness, let y^* be a fixed point of G in $U(x_0, r_4)$. Then using (14) we get

$$\|x^* - y^*\| = \|G(x^*) - G(y^*)\| \leq \sup_{y \in [x^*, y^*]} \|G'(y)\| \|x^* - y^*\| \leq h(r) \|x^* - y^*\|$$

which shows $x^* = y^*$.

Furthermore by letting $m \rightarrow \infty$ in (23) we obtain (16). Finally by (2) we obtain for all $n \geq 0$

$$\begin{aligned} x_{n+1} - x^* &= x_n - x^* - \mu(x_n)\nu(x_n) = \mu(x_n)[\mu^{-1}(x_n)(x_n - x^*) - \nu(x_n)] \\ &= \mu(x_n)[F(x_n) - F(x^*) - F'\{P(x_n)\}(x_n - x^*)] \end{aligned} \quad (24)$$

But we can also have by (11) and (23) that for all $n \geq 0$

$$\|x_n - P(x_n)\| = \|x_n - x^* + P(x^*) - P(x_n)\| \leq (1 + a)\|x_n - x^*\| \quad (25)$$

$$\|P(x_n) - x^*\| = \|P(x_n) - P(x^*)\| \leq a\|x_n - x^*\| \quad (26)$$

Estimate (17) now follows from (24), (25), (26) and the approximation

$$F(x_n) - F(x^*) - F'\{P(x_n)\}(x_n - x^*) = \int_0^1 [F'(tx_n + \tau x^*) - F'\{tP(x_n) + \tau P(x_n)\}](x_n - x^*) dt \quad (27)$$

where $\tau = 1 - t$.

We now state the following theorem for comparison (see [2], [3], [6] and the references there for a proof).

Theorem 2. Let F be Frchet differentiable on $D \subseteq E$. Assume:

(a₁) Condition (a) holds;

(b₁)

$$P(x) = F(x); \quad (x \in D) \quad (28)$$

(c₁)

$$c < d_0 \quad \text{where} \quad d_0 = \frac{2(1-a)}{1+2a}; \quad (29)$$

(d₁)

$$U(x_0, r_0) \subseteq D, \quad \text{where} \quad r_0 = \frac{2c}{b(1-a)}, \quad \text{for } b \neq 0. \quad (30)$$

Then Stirling's iteration $\{x_n\} (n \geq 0)$ converges to the unique fixed point x^* of F in $U(x_0, r_0)$ at the rate given by (17).

Remark 1. Favorable comparisons of Stirling's over Newton's method have been made in [2], [3], [6] and the references there.

Proposition. Under the hypotheses of Theorems 1 and 2, assume:

$$c < \frac{(1-a)^3}{3+a} = d_1. \quad (31)$$

Then the following hold:

$$r_1 < r_0 < r_3, \quad (32)$$

$$U(x_0, r_0) \subseteq U(x_0, r_3). \quad (33)$$

Proof. Estimates (32) and (33) follow immediately by the definition of r_1, r_0, r_3 and (31).

Remark 2. Let $d_2 = \min\{d_1, d, d_0\}$, under the hypotheses of Theorems 1 and 2. Then the conclusions of the proposition hold. This observation justifies the claim made at the introduction.

We complete this study with an example.

Example. Let $E = R$, $D = \left[-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}\right]$, $P(x) = F(x) = \frac{1}{2} \sin x$.

For $x_0 = 0.1396263 = 8^\circ$, we obtain $d = \frac{3-2\sqrt{2}}{4} = 0.0428932$, $d_0 = \frac{1}{2} = 0.5$, $d_1 = \frac{1}{28} = 0.0357143$, $a = b = \frac{1}{2}$, $\nu(x_0) = \|x_0 - F(x_0)\| = 0.0700397$, $c = 0.0350199$, $r_0 = 0.2801592$ and $r_3 = 0.2866401$. With the above values the hypotheses of Theorem 1,2 and the Proposition are satisfied. Hence we get

$$0 = x^* \in U(x_0, r_0) = [-0.1405329, 0.4197855] \subseteq (-0.1470138, 0.4262664) = U^0(x_0, r_3).$$

That is there are infinitely many new starting points in $U^0(x_0, r_3) - U(x_0, r_0)$ for which iteration (2) converges to x^* but Theorem 2 does not guarantee that, whereas Theorem 1 does.

References

- [1] Argyros, I.K. (1995): *Stirling's method in generalized Banach spaces*. Annales Univ. Sci. Budapest Sect. Comp. **15**, 37-47.
- [2] Argyros, I.K. (1995): *On the a posteriori error estimates for Stirling's*. Studia Scientiarum Mathematicarum Hungarica. **31**, 1-12.
- [3] Argyros, I.K. and Szidarovsky, F.: *The Theory and Applications of Iteration Methods*. C.R.C. Press. Inc. Boca Raton, Florida, 1993.
- [4] Gutiérrez, J.M. Hernández, M.A. and Salanova, M.A. (1995): *Accessibility of solutions by Newton's method*. Intern. J. Computer. Math. Vol **57**, 239-247.
- [5] Kantotovich, L.V. and Akilov, G.P.: *Functional Analysis*. Pergamon Press. New York. U.S.A. 1982.
- [6] Stirling, J.: *Methodus differentialis: sive tractatus de summationis et interpolatione serierum infinitarum*. W. Boyer. London. U.K. 1730.

Error bounds for the Halley-Werner method in Banach spaces

Ioannis K. Argyros

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

Abstract

We approximate zeros of nonlinear operator equations in a Banach space setting using Newton-Kantorovich assumptions and the majorant theory for the Halley-Werner method. Error bounds are improved over earlier ones under weaker assumptions.

1. Introducción

Let E_1, E_2 , be Banach spaces and let $U(x_0, R)$ denote the closed ball with center $x_0 \in E_1$ and of radius $R \geq 0$ in E_1 . Suppose that the nonlinear operator F defined on some convex subset D of E_1 containing $U(x_0, R)$, with values in E_2 , is twice Fréchet-differentiable at every interior point of $U(x_0, R)$ and satisfies the conditions

$$\|F'(x+h) - F'(x)\| \leq A(r, \|h\|), \quad (1) \quad \|F''(x)\| \leq M, \quad (2)$$

$$\|F'''(x+h) - F'''(x)\| \leq B(r, \|h\|), \quad (3)$$

for all $x \in U(x_0, R)$, $0 \leq r \leq R$, $0 \leq \|h\| \leq R-r$

Here A, B , are nonnegative and continuous functions such that if one of the variables is fixed, then they are nondecreasing functions of the other on the interval $[0, R]$.

Moreover we assume that $\frac{\partial A(0,t)}{\partial t}$ is positive, continuous and nondecreasing on $[0, R-r]$, with $A(0,0) = 0$.

Note that by setting for all $r, \|h\|$, $A(r, \|h\|) = c\|h\|$ for some $c > 0$, we obtain the usual Lipschitz conditions on F' (see [4], [9]), whereas for $A(r, \|h\|) = e(r)\|h\|$ we obtain some generalized conditions considered also in [9], but for Newton's method. Conditions of the form (1) we also considered in [22], for Newton's method.

We denote by $F'(x_n)$ and $F''(x_n)$ the first and second Fréchet-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 $n \geq 0$, [2], [3].

Let $x_0 \in E_1$ be arbitrary and define the Halley-Werner method on E_1 for all $n \geq 0$ by

$$y_n = x_n - F'(x_n)^{-1}F(x_n), \quad (4) \quad H(x_n, y_n) = -F'(x_n)^{-1}F''(x_n)(y_n - x_n), \quad (5)$$

$$x_{n+1} = y_n - \frac{1}{2}f'(x_n)^{-1} \left[1 - \frac{a}{2}H(x_n, y_n) \right]^{-1} F'''(x_n)(y_n - x_n)^2. \quad (6)$$

Halley method has a very long history. One can refer to [5], [6], [9], [12], [14], [15], [17], [20], [21], and the references there for some background.

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

$$F(x) = 0 \quad (7)$$

Using the majorant theory, we will show that under certain Newton-Kantorovich assumptions on the part (F, x_0) the Halley-Werner method converges to a locally unique zero x^* of the equation (7). We also provide upper bounds on the distances $\|x_n - x^*\|$ and $\|y_n - x^*\|$ for all $n \geq 0$. Finally, we show that our results improve earlier ones [11]-[22].

2. Convergence Analysis

It is convenient to introduce the constants

$$\eta \geq \|y_0 - x_0\|, \quad \beta \geq \|F'(x_0)^{-1}\|, \quad t_0 = 0, \quad s_0 \geq \eta, \quad t_1 \geq s'_0 = \frac{\beta M \eta^2}{2 - \beta M \eta}, \quad (8)$$

the scalar iterations for all $n \geq 0$

$$s_{n+1} = t_{n+1} + D((t_{n+1})P(t_n, s_n), \quad (9)$$

$$t_{n+2} = s_{n+1} + \frac{1}{2}D((t_{n+1})C((t_{n+1})M(s_{n+1} - t_{n+1})^2, \quad (10)$$

where

$$D(t_n) = \frac{\beta}{1 - \beta A(0, t_n)}, \quad C(t_n) = \frac{1}{1 - \frac{M|a|}{2}D(t_n)(s_n - t_n)} \quad (11)$$

and

$$\begin{aligned} P(t_n, s_n) &= \int_{s_n}^{t_{n+1}} A(s_n, t)dt + A(t_n, s_n - t_n)(t_{n+1} - s_n) \\ &\quad + \frac{1}{2}C(t_n)D(t_n)M(s_n - t_n) \int_{t_n}^{s_n} A(t_n, t)dt \\ &\quad + \frac{|a|}{2}C(t_n) \int_{t_n}^{s_n} B(t_n, t)dt(s_n - t_n)^2. \end{aligned} \quad (12)$$

Furthermore, we define the function T on $[0, R]$ by

$$\begin{aligned} T(r) &= t_1 + D(r) \left[\int_0^r A(r, t)dt + A(r, t)r + \frac{1}{2}C(r)D(r)Mr \int_0^r A(r, t)dt \right. \\ &\quad \left. + \frac{r^2}{2}C(r) \int_0^r B(r, t)dt + \frac{|a|r^2}{2}C(r)M \right], \end{aligned} \quad (13)$$

where

$$C(r) = \frac{1}{1 - \frac{M|a|}{2}D(r)r}. \quad (14)$$

We can now prove the main result:

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

Assume:

- (a) F is twice Fréchet-differentiable on $U(x_0, R) \subseteq D$ for some $X_0 \in d$, $R \geq 0$, and satisfies conditions (1)-(3).
- (b) the inverse of the linear operator $F'(x_0)$ exists.
- (c) there exists a minimum nonnegative number R_1 , with

$$T(R_1) \leq R_1, \quad (15) \quad R_1 \leq R. \quad (16)$$

- (d) the following estimates are also true:

$$\beta A(0, R_1) < 1, \quad (17) \quad \frac{M|a|\beta R_1}{2[1 - \beta A(0, R_1)]} < 1, \quad (18)$$

and if $R \neq R_1$ is

$$\frac{\beta}{R - R_1} \int_{R_1}^R A(0, t) dt < 1. \quad (19)$$

Then

- (i) the scalar sequence $\{t_n\}$ ($n \geq 0$) defined by (9)-(10) is monotonically increasing and bounded above by its limit R_1 for all $n \geq 0$.
- (ii) the Halley-Werner method $\{x_n\}$ ($n \geq 0$) generated by (4)-(6) is well defined, remains in $U(x_0, R_1)$ for all $n \geq 0$ and converges to a unique zero x^* of equation $F(x) = 0$ in $U(x_0, R)$.

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

$$\|x_n - x^*\| \leq R_1 - t_n, \quad (20) \quad \|y_n - x^*\| \leq R_1 - s_n, \quad (21)$$

Proof.— (i) We will show that sequence $\{t_n\}$ ($n \geq 0$) is monotonically increasing and bounded above by R_1 and as such it converges to R_1 (by (c) and (15)). From (8)-(10) and (16) $t_0 \leq s_0 \leq t_1 \leq s_1 \leq t_2$. By assuming $t_k \leq s_k \leq t_{k+1}$, $k = 0, 1, 2, \dots, n$, we obtain $t_{k+1} \leq s_{k+1} \leq t_{k+2}$ from (9), (10) and the hypotheses on A and B . Hence, $\{t_n\}$ ($n \geq 0$) is monotonically increasing. From (8) and (16) $t_0 \leq t_1 \leq R_1$, and from (10) for $n = 0$, $t_2 \leq T(R_1) \leq R_1$. Let us assume that $t_k \leq R_1$ for $k = 0, 1, 2, \dots, n+1$. Then from (9)-(10) we get in turn

$$\begin{aligned} t_{n+2} &= t_{n+1} + D(t_{n+1}) \left[P(t_n, s_n) + \frac{1}{2} C(t_{n+1}) M((s_{n+1} - t_{n+1})^2) \right] \leq \\ &\leq t_{n+1} + D(R_1) \left[P(t_n, s_n) + \frac{1}{2} C(R_1) M((s_{n+1} - t_{n+1})^2) \right] \leq \dots \\ &\leq t_1 + D(R_1) \left[\sum_{i=0}^n \int_{s_i}^{t_{i+1}} A(s_i, t) dt + A(R_1, R_1) \sum_{i=0}^n (t_{i+1} - s_i) + \frac{1}{2} C(R_1) D(R_1) M R_1 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} D(R_1) R_1^2 \sum_{i=0}^n \int_{t_i}^{s_i} B(t_i, t) dt + \frac{|a|}{2} C(R_1) M \sum_{i=0}^n (s_{i+1} - t_{i+1})^2 \right] \leq T(R_1) \leq R_1 \end{aligned}$$

Hence, $\{t_n\}$ ($n \geq 0$) is bounded above R_1 . Moreover $t_k \leq s_k \leq t_{k+1} \leq R_1$ for all $k \geq 0$. That completes the proof of part (i) (ii) Wew will show that if

$$\|y_n - x_n\| \leq s_n - t_n \quad (n \geq 0), \quad (22) \quad \|F(x_n)\| \leq P(t_{n-1}, s_{n-1}) \quad (n \geq 1), \quad (23)$$

$$\|F'(x_{n+1})^{-1}\| \leq D(t_{n+1}) \quad (n \geq -1), \quad (24)$$

$$\frac{|a|}{2} \|H(x_n, y_n)\| \leq \frac{|a|}{2} MD(t_n)(s_n - t_n) < 1. \quad (25)$$

then, for all $n \geq 0$

$$\|x_{n+1} - y_n\| \leq t_{n+1} - s_n, \quad (26) \quad \|F(x_{n+1})\| \leq P(t_n, s_n), \quad (27)$$

$$\|y_{n+1} - x_{n+1}\| \leq s_{n+1} - t_{n+1}. \quad (28)$$

From (2), (6), (23) and (24), we obtain

$$\begin{aligned} \|x_{n+1} - y_n\| &\leq \frac{1}{2} \|F'(x_n)^{-1}\| \left\| 1 - \frac{1}{2} H(x_n, y_n)^{-1} \right\| \|F'''(x_n)\| \|F(x_n)\| \\ &\leq \frac{\beta M}{2[1 - \beta A(0, t_n)]} C(t_n) P(t_{n-1}, s_n) = t_{n+1} - s_n. \end{aligned}$$

Hence, (21) is true.

Putting $\mu_n = x_{n+1} - y_n$, $z_n = y_n - x_n$, from (1)-(6), (8)-(12), (22)-(24) and the approximation

$$\begin{aligned} R(x_{n+1}) &= \int_0^1 [F'(y_n + t\mu_n) - F'(y_n)] \mu_n dt + (F'(y_n) - F'(x_n)) \mu_n \\ &\quad + \frac{a}{2} [1 - H z_n]^{-1} F'(x_n)^{-1} F'''(x_n) z_n \int_0^1 [F'(x_n + tz_n) - F'(x_n)] z_n dt \\ &\quad + \left[1 - \frac{a}{2} H(x_n, y_n)^{-1} \right] \int_0^1 [F'''(x_n + tz_n) - F'''(x_n)] (1-t) z_n^2 dt. \end{aligned} \quad (29)$$

we obtain by using the triangle inequality in turn

$$\begin{aligned} \|F(x_{n+1})\| &\leq \int_{s_n}^{t_{n+1}} A(s_n, t) + (t_n, s_n - t_n) + \frac{|a|}{2} C(t_n) D(t_n) M(s_n - t_n) \int_{t_n}^{s_n} A(t_n, t) dt \\ &\quad + \frac{1}{2} C(t_n) \int_{t_n}^{s_n} B(t_n, t) dt (s_n - t_n)^2 = P(t_n, s_n). \end{aligned}$$

We have also used the estimates

$$\begin{aligned} \|x_{n+1} - x_0\| &\leq \|x_{n+1} - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \leq \|x_{n+1} - y_n\| + \|y_n - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \\ &\leq \dots \leq (t_{n+1} - s_n) + (s_n - s_0) + s_0 = t_{n+1} \leq R_1, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \|y_{n+1} - x_0\| &\leq \|y_{n+1} - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \leq \|y_{n+1} - x_{n+1}\| + \|x_{n+1} - y_n\| + \|y_n - y_0\| \\ &\quad + \|y_0 - x_0\| \leq \dots \leq (s_{n+1} - t_{n+1}) + (t_{n+1} - s_n) + (s_n - s_0) \leq s_{n+1} \leq R_1. \end{aligned} \quad (31)$$

Hence, (27) is true.

From (4), (22) and (27)

$$\|y_{n+1} - x_{n+1}\| \leq \|F'(x_{n+1})^{-1}\| \cdot \|F(x_{n+1})\| P(t_n, s_n) = s_{n+1} - t_{n+1}.$$

Hence, (28) is also true.

Moreover, from (1), (8), (17), (30) and the estimate

$$\|F'(x_0)^{-1}\| \cdot \|F'(x_n) - F'(x_0)\| \leq \beta A(0, t_n) \leq \beta A(0, R_1) < 1,$$

it follows from the Banach lemma on invertible operators [13] that $F'(x_n)^{-1}$ exists and for all $n \geq 1$

$$\|F'(x_n)^{-1}\| \leq \frac{\|F'(x_0)^{-1}\|}{1 - \|F'(x_0)^{-1}\| \cdot \|F'(x_n) - F'(x_0)\|} \leq D(t_n),$$

Furthermore, from (2), (18), (22), (24) and the estimate

$$\frac{|a|}{2} \|H(x_n, y_n)\| \leq \frac{|a|}{2} \|F'(x_n)^{-1}\| \|F''(x_n)\| \|x_n - y_n\| \leq MD(t_n)(s_n - t_n) \leq MD(R_1)R_1 < 1,$$

it follows that $1 - \frac{a}{2}H(x_n, y_n)$ is invertible, and for all $n \geq 0$ we obtain

$$\left\| \left(1 - \frac{a}{2}H(x_n, y_n) \right)^{-1} \right\| \leq C(t_n).$$

Hence, the iterates generated by (4)-(6) are well defined for all $n \geq 0$. Also, by (26), (28) and for all $n \geq 0$, we obtain

$$\|x_{n+1} - x_n\| \leq t_{n+1} - t_n, \quad \|y_{n+1} - y_n\| \leq s_{n+1} - s_n. \quad (32)$$

It now follows from (32) and (i) that the sequence x_n ($n \geq 0$) is Cauchy in a Banach space, and as such it converges to some $x^* \in U(x_0, R_1)$, which by taking the limit as $n \rightarrow \infty$ in (4) becomes a zero of F , since $F(x^*) = 0$. Moreover, by (30) and (31) $x_n, y_n \in U(x_0, R_1)$ for all $n \geq 0$. The estimates (20) and (21) now follow from (32).

Finally to show uniqueness, we assume there exists another zero y^* of equation (7) in $U(x_0, R)$. Then from (1) and (24), we obtain by (19)

$$\begin{aligned} & \|F'(x_0)^{-1}\| \int_0^1 \|F'(y^* + t(x^* - y^*)) - F'(x_0)\| dt \\ & \leq \int_0^1 A(0, (1-t)\|x_0 - y^*\| + t\|x_0 - x^*\|) dt < 1. \end{aligned}$$

It now follows from the above inequality that the linear operator

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

is invertible, and with the help of the approximation

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

it follows that $x^* = y^*$, that completes the proof of the theorem.

Remarks.- (a) From the estimates

$$\|x_n - y_0\| \leq \|x_n - y_n\| + \|y_n - y_0\| \leq (t_n - s_n) + (s_n - s_0) \leq t_n - \eta \leq R_1 - \eta$$

$$\begin{aligned} \|y_{n+1} - y_0\| &\leq \|y_{n+1} - x_{n+1}\| + \|x_{n+1} - y_n\| + \|y_n - y_0\| \\ &\leq (s_{n+1} - t_{n+1}) + (t_{n+1} - s_n) + (s_n - s_0) \leq s_{n+1} - \eta \leq R_1 - \eta \end{aligned}$$

it follows that $x_n, y_n \in U(y_0, R_1 - \eta)$ for all $n \geq 0$. Note also that R_1 is the unique nonnegative zero of $T(r) - r = 0$ in $[0, R_1]$ by (15). (b) We can use the Halley-Werner method to approximate nonlinear equations with nondifferentiable operators. Indeed consider the equation

$$F_1(x) = F(x) + Q(x) = 0, \quad (33)$$

with F as before and Q satisfying an estimate of the form

$$\|Q(x+h) - Q(x)\| \leq E(r, \|h\|), \quad x \in U(x_0, R), \quad 0 \leq r \leq R, \quad 0 \leq \|h\| \leq R - r$$

where E is a nonnegative and continuous function of two variables such that if one of the variables is fixed, then E is a non-decreasing function of the other on the interval $[0, R]$. Note that the differentiability of Q is not assumed here. Replace F in (2) by F_1 and leave the Fréchet-derivatives as they are. Define the sequences $\{\bar{t}_n\}$ and $\{\bar{s}_n\}$ ($n \geq 0$) as the corresponding $\{t_n\}$ and $\{s_n\}$ ($n \geq 0$) given (9) and (10) respectively. The change will be an extra term of the form $E(t_n, s_n - t_n)$ added in the definition of $P(t_n, s_n)$. Define T_1 by T in (13) the insert inside the bracket the term $E(r, r)$. Then following the proof of the above theorem step by step we can show a similar theorem with identical hypotheses and conclusions, but holding for equation (33). (See also [4], [9], [22]) (c) Following the proof of the theorem, we can show the result (see also [9]):

Theorem 2.- Let $F: D \subset E_1 \rightarrow E_2$, E_1, E_2 be real Banach spaces, and D be an open convex domain. Assume that F has 2nd order continuous Fréchet derivatives on D and that, for $x, y \in D$ and $U(y_0, r_1 - \eta) \subset D$, the following conditions are satisfied:

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

$$\|F'(x_0)^{-1}\| \leq \beta, \quad \|y_0 - x_0\| \leq \eta, \quad \left[\frac{(2+a)M^2}{2-a} + \frac{2N}{3(2-a\beta)} \right]^{1/2} \leq K,$$

$$h = K\beta\eta \leq \begin{cases} 0.485... & \text{if } 0 \leq a \leq 1 \\ 0.5 & \text{if } 1 < a \leq 2 \end{cases}$$

Moreover, we define

$$g(t) = \frac{1}{2}Kt^2 - \frac{1}{\beta}t + \frac{\eta}{\beta}, \quad r_1 = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{h}\eta, \quad \theta = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{1 + \sqrt{1 - 2h}},$$

where r_1 is the smallest zero of the equation $g(t) = 0$. Then the Halley-Werner method (4)-(6) is convergent. Also $x_n, y_n \in U(y_0, r_1 - \eta)$, for all $n \in N_0$. The limit x^* is the unique zero of the equation $F(x) = 0$ in $U(x_0, r'_2)$, $r_1 \leq r'_2 < r_2$ if $\alpha = K$; or $M = K$ and $r'_2 = r_2$ if $\alpha < K$, or $M < K$.

Moreover, we have the following error estimates and optimal error constants for all $n \geq 0$:

$$\|x_n - x^*\| \leq r_1 - t_n^1, \quad \|y_n - x^*\| \leq r_n^1 - s_1, \quad r_1 - t_n^1 = \frac{(1 - \theta^2)\eta}{1 - \theta^{3n-1}},$$

where

$$s_n^1 = t_n^1 - \frac{g(t_n^1)}{g'(t_n^1)}, \quad t_0^1 = 0, \quad h(t_n^1, s_n^1) = -g'(t_n^1)g''(t_n^1)(s_n^1 - t_n^1),$$

and for all $n \geq 0$

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

(d) Several sufficient conditions can be given to show that under the hypotheses of Theorems 1 and 2, is $s_n - t_n \leq s_n^1 - t_n^1$ for all $n \geq 0$. One such condition can be

$$D(r) \left[\int_0^r A(r, t) dt + A(r, t)r + \frac{|a|}{2} C(r) D(r) M r \int_0^r A(r, t) dt \right] \leq s_1^1 - t_1^1, \quad \text{or} \quad \leq -\frac{g(r)}{g'(r)}$$

for all $r \in [0, \min\{r_1, R_1\}]$, although the details are left to the motivated reader.

(e) By Theorems 1 and 2, we conclude that under the order of convergence for the Halley-Werner method is three, whereas for Newton's method is only two, [4], [13].

(f) Similar theorems can be proved if $\|h\|$ in (1) and (3) is replaced by a Hlder condition of the form $\|h\|^p$ for some $p \in [0, 1]$, [9].

(g) The function A , for $x, y \in U(x_0, r)$ and $\|h\| \leq R - r$, can be chosen as

$$A(r, \|h\|) = \sup \|F'(x + h) - F'(x)\|, \quad \text{or} \quad A(r, \|h\|) = \int_r^{r+\|h\|} q(t) dt$$

where q , for $x, y \in U(x_0, r)$, is a nondecreasing function on the interval $[0, R]$, satisfying the condition

$$\|F'(x) - F'(y)\| \leq q(r)\|x - y\|.$$

Similarly, the function B , for $x, y \in U(x_0, r)$ and $\|h\| \leq R - r$, can be given by

$$B(r, \|h\|) = \sup \|F''(x + h) - F''(x)\|.$$

Other choices are to be equal to the usual Lipschitz or Pták-like conditions usually imposed on F (see, e.g. [4], [9], [22]). Other choices are also possible.

One can refer to [9] for some possible applications of these ideas to the solution of integral equations.

(h) Finally, if the right hand sides of conditions (1) and (3) change to, and $B(r, r + \|h\|)$ a new theorem similar to Theorem 1 can then follow immediately. Remarks similar to (a)-(g) above for the new condition can then follow also.

(i) Using the estimate

$$\|F''(x)\| \leq \|F''(x) - F''(x_0)\| + \|F''(x_0)\| \leq B(R_1, 0) + \|F''(x_0)\| = M^*,$$

we see that hypotheses (2) can be replaced by the weaker one, given by

$$\|F''(x)\| \leq M^*.$$

(j) The Lipschitz condition (3) can be dropped, but the order of convergence will be slower (see also [5], [9]).

3. Applications

In this section we will give an example for Theorem 2, when $a = 1$ (similarly we can work for Theorem 1). We first note that by eliminating $y_n (n \geq 0)$ from approximations (2)-(4) we can obtain the method of tangent hyperbolas (or Chebyshev-Halley) which has been extensively studied in [1], [5], [6], [9], [12], [14], [15], [17], [18], [20], [21]. In all but our references it is assumed that $N > 0$, which means that their results cannot apply to solve quadratic operator equations of the form

$$P(x) = B(x, x) + L(x) + z, \quad (34)$$

where B, L , are bounded quadratic and linear operators respectively with z fixed in R_1 . We then have that $P'(x) = 2B(x) + L$ and $P''(x) = 2Q$. Hence we get $M = 2\|B\|$ and $N = 0$. Integral equations that can be formulated in the form $P(x) = 0$, have very important applications in radiative transfer, [2], [3], [9], [10].

As a specific example, let us consider the solution of quadratic integral equations of the form

$$x(s) = y(s) + \lambda x(s) \int_0^1 q(s, t)x(t)dt, \quad (35)$$

in the space $E_1 = C[0, 1]$ of all continuous functions on the interval $[0, 1]$, with norm

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

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

$$(i) \quad 0 \leq q(s, t) \leq 1, \quad 0 < s, t \leq 1, \quad q(0, 0) = 1;$$

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

The function $y(s)$ is a given continuous function defined on $[0, 1]$, and finally $x(s)$ is the unknown function sought in $[0, 1]$.

Equations of this type are closely related with the work of S. Chandrasekhar [10] (Nobel prize of physics 1983), and arise in the theories of radiative transfer, neutron transport and the kinetic theory of gasses, [2], [3], [9], [10].

There exists an extensive literature on equations like (36) under various assumptions on the kernel $q(s, t)$ and λ is a real or complex number. One can refer to the recent work in [2], [3], [9], and the reference there. Here we demonstrate that the theorem via the iterative procedure (4)-(6) provides existence results for (35).

For simplicity (without loss of generality) we will assume that, for all $0 < s, t \leq 1$, $q(0, 0) = 1$,

$$q(s, t) = \frac{s}{s+t}$$

Note that $q(s, t)$ so defined satisfies (i) and (ii) above.

Let us now choose $\lambda = 0.25$, $y(s) = 1$ for all $s \in [0, 1]$; and define the operator P on E_1 by

$$P(x) = \lambda x(s) \int_0^1 \frac{s}{s+t} x(t) dt - x(s) + 1.$$

Note that every zero of the equation $P(x) = 1$ satisfies the equation (35).

Set $x_0(s) = 1$, use the definition of the first and second Frechet-derivatives of the operator P to obtain using the theorem,

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

$$K = M\sqrt{3} = 0.600283066, \quad \beta = \|P'(1)^{-1}\| = 1.53039421,$$

$$\eta \geq \|P'(1)^{-1}P(1)\| \geq \beta \lambda \ln 2 = 0.265197107, \quad h = 0.243628554 < 0.5,$$

$$r_1 = 0.3090766, \quad r_2 = 1.867984353, \quad \theta = 0.16549951.$$

(For detailed computations, see also [2], [8], and [10]).

Therefore according to Theorem 2 equation (35) has a solution x^* and the two-point method (4)-(6) converges to x^* . Note that the results obtained in [1], [12], [14], [15], [17], [18], [20], [21], cannot apply here, since $N = 0$. For Theorem 1 we can take $A(r, t) = \alpha t$ and $B(r, t) = 0$ for all $r \in [0, R]$. The computational details for this case are left to the motivated reader.

References

- [1] Altman, M.: "Iterative methods of higher order", *Bull. Acad. Polon. Sci. ser. Math. Ast. Phys.* **9**, 63-68, (1961).
- [2] Argyros, I.K.: "Quadratic equations and applications to Chandrasekhar's and related equations", *Bull. Austral. Math. Soc.* **32**, 275-292, (1985).
- [3] Argyros, I.K.: "On a class of nonlinear integral equations arising in neutron transport", *Aequationes Mathematicae.* **36** 94-111, (1988).
- [4] Argyros, I.K.: "On the solution of equations with nondifferentiable operators and Pták error estimates" *BIT.* **90**, 752-754, (1990). 155-162
- [5] Argyros, I.K.: "On the convergence of a Halley-Chebyshev-type method under Newton-Kantorovich hypotheses", *Appl. Math. Letters.* **6**, 5, 71-74, (1993).
- [6] Argyros, I.K. and Chen, D.: "A note on the Halley method in Banach spaces" *Appl. Math. Comp.* **58**, 215-224, (1993).
- [7] Argyros, I.K.: "A fourth order method in Banach spaces", *Appl. Math. Letters.* **6**, 4, 97-98, (1993).
- [8] Argyros, I.K. and Szidarovsky, F.: "On the monotone convergence of general Newton-like methods", *Bull. Austral. Math. Soc.* Vol. **45**, 489-502, (1992).
- [9] Argyros, I.K. and Szidarovsky, F.: *The theory and application of iteration methods.* C.R.C. Press, Inc. Boca Raton, Florida. (1993).
- [10] Chandrasekhar, S.: *Radiative transfer.* Dover Pu., New York. (1960).
- [11] Chen, X. and Yamamoto, T.: "Convergence domains of certain iterative methods for solving nonlinear equations", *Numer. Func. Anal. and Optimiz.* **10**, (1 and 2), 37-48, (1989).
- [12] Kanno, S.: "Convergence theorems for the method of tangent hyperbolas", *Math. Japonica.* **37**, N 4, 711-722, (1992).
- [13] Kantorovich, L.V. and Akilov, G.P.: *Functional Analysis in normed spaces.* Pergamon Press, New York, 1964.
- [14] Mertvecova, M.A.: "An analog of the process of tangent hyperbolas for general functional equations", *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, (Russian) **88**, 611-614, (1953).

- [15] Necepurenko, M.T.: "On Chebyshev's method for functional equations", *Usephi. Mat. Nauk.* (Russian) **9**, 163-170, (1954).
- [16] Potra, F.A. and Pták, V.: "Sharp error bounds for Newton process", *Numer. Math.* **34**, 63-72, (1980).
- [17] Potra, F.A.: "On an iterative algorithm of order 1.839... for solving nonlinear operator equations", *Numer. Func. Anal. and Optimiz.* **7**, (1), 75-106, (1984-85).
- [18] Safiev, R.A.: "The method of tangent hyperbolas", *Sov. Math. Dokl.* **4**, 482-485, (1984-85).
- [19] Taylor, A.E.: *Introduction to Functional Analysis*. Wiley Pub. New York. (1957).
- [20] Ul'm, S.: "Iteration methods with divided differences of the second order", *Dokl. Akad. Nauk, SSSR.* (Russian) **158**, 55-58, and *Soviet Math. Dokl.* (Russian) **5**, 1187-1190, (1964).
- [21] Yamamoto, T.: "On the method of tangent hyperbolas in Banach spaces", *J. Comput. Appl. Math.* **21**, 75-86, (1988).
- [22] Zabrejko, P.P. and Nguen, D.F.: "The majorant method in the theory of Newton-Kantorovich approximations and the Pták error estimates", *Numer. Func. Anal. and Optimiz.* **9**, (5 and 6), 671-684 (1987).

On a two-point Newton method in Banach spaces and the Pták error estimates

Ioannis K. Argyros

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

Abstract

Pták error estimates are obtained for a two point Newton method of order four in Banach spaces using the majorant method.

1. Introduction

In this study we are concerned with the problem of approximating a locally unique zero 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 .

Pták, Potra [7], Zabrejko, Nguen [8], Argyros [1], [2], [3], and others have used the method of "continuous induction" to find error estimates for single-step Newton's as well as Newton-like methods under various Newton-Kantorovich-like assumptions. This method is based on a special variant of Banach's closed graph theorem.

The convergence analysis for multistep methods is less developed, although the fundamental theory was introduced several years ago (see [5], [6], and the references there). The reason is that the expression $F(x)$ cannot easily be dominated (in norm) by a real scalar function. It is well known, from the efficiency index point of view [6], that multipoint methods are faster than single-step methods.

In particular, in this study we consider a two-step Newton method of the form

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

for some arbitrary $x_0 \in D$ and for all $n \geq 0$. The linear operator $F'(x_n)$ is the Fréchet-derivative of F evaluated at $x = x_n$.

Using the majorant method we will show that under certain assumptions of the pair (F, x_0) the point Newton method defined by (2)-(3) converges to a locally zero x^* of

equation (1). We also provide Pták error estimates on the distances $\|x_n - x^*\|$ and for all $n \geq 0$, which are better than the ones obtained if standard Newton-Kantorovich assumptions are required. The order of convergence is four in this case.

Finally, we study the problem when F is not Fréchet-differentiable.

2. Convergence Analysis

Let $F : D \subseteq E_1 \rightarrow E_2$, where D is a convex domain and $x_0 \in D$. We assume that the Fréchet derivative of F satisfies the condition

$$\|F'(x_1) - F'(x_2)\| \leq q(r)\|x_1 - x_2\| \quad (4)$$

for all $x_1, x_2 \in U(x_0, r)$, $0 \leq r \leq R$, and where q is a nondecreasing function on $[0, R]$, for some $R > 0$ with

$$U(x_0, R) = \{x \in E_1 \mid \|x - x_0\| \leq R\} \subseteq D.$$

Note that by setting $q(r) = c$ for all $r \in [0, R]$, one can obtain the usual Lipschitz conditions on F' considered in [5], [6].

It is convenient to introduce the function $\Omega(x) = \frac{\beta}{1 - \beta w(x)}$ and the constants

$$\eta \geq \|y_0 - x_0\|, \quad \beta \geq \|F'(x_0)^{-1}\|, \quad t_0 = 0, \quad s_0 \geq \eta, \quad t_1 \geq s_0 + s_0^*, \quad s_1 \geq t_1 + s_0^* \quad (5)$$

where

$$s_0^* = \Omega(s_0)B(w, t_0, s_0), \quad w(r) = \int_0^r q(t)dt, \quad s_1^* = \Omega(t_1)A(w, t_0, s_0, t_1) \quad (6)$$

the scalar iterations

$$s_{n+1} = t_{n+1} + \Omega(t_{n+1})A(w, t_n, s_n, t_{n+1}), \quad (7) \quad t_{n+1} = s_n + \Omega(s_n)B(w, t_n, s_n), \quad (8)$$

where, for all $n \geq 0$,

$$A(w, t_n, s_n, t_{n+1}) = \int_{s_n}^{t_{n+1}} w(t)dt - w(s_n)(t_{n+1} - s_n), \quad (9)$$

$$B(w, t_n, s_n) = \int_{t_n}^{s_n} w(t)dt - w(t_n)(s_n - t_n), \quad (10)$$

and the function T on $[0, R]$ by

$$T(r) = s_0 + \Omega(r) \int_0^r w(t)dt. \quad (11)$$

We can now prove the main result:

Theorem 1.—Let $F : D \subset E_1 \rightarrow E_2$ be a nonlinear operator defined on some convex subset D of a Banach space E_1 with values in a Banach space E_2 . Assume:

(a) F is Fréchet-differentiable on $U(x_0, R) \subseteq D$, $x_0 \in D$, $R \geq 0$, and satisfies (4).

(b) the inverse of the linear operator $F'(x_0)$ exists.

(c) there exists a minimum positive number R_1 , with

$$R_1 \leq R, \quad (12) \quad T(R_1) \leq R_1, \quad (13)$$

and R_1 also satisfies the condition $w(R) < \frac{1}{\beta}$. (14)

Then:

(i) The sequences $\{t_n\}$, $\{s_n\}$ ($n \geq 0$), defined by (7)-(8), respectively are monotonically increasing and bounded above by their common limit $R_2 = R_1$ for all $n \geq 0$;

(ii) The two-point step Newton method generated by (2)-(3) is well defined, remains in $U(x_0, R_1)$ for all $n \geq 0$, and converges to a unique zero x^* of equation $F(x) = 0$ in $U(x_0, R)$.

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

$$\|x_n - x^*\| \leq R_1 - t_n, \quad (15) \quad \|y_n - x^*\| \leq R_1 - s_n. \quad (16)$$

Proof.

(i) It is enough to show that the sequence $\{s_n\}$ ($n \geq 0$) is monotonically increasing and bounded above by R_1 with $R_2 = R_1$. From (5), (8) $t_0 \leq s_0 \leq t_1 \leq s_1$. By assuming $t_k \leq s_k \leq t_{k+1} \leq s_{k+1}$, ($k = 0, 1, \dots, n$) we obtain from (7) and (8) that the sequences $\{t_n\}$ and $\{s_n\}$ are monotonically increasing. From (5), (7), (8), for $n = 0$, (12) and (13) we get $t_0 \leq s_0 \leq t_1 \leq s_1 \leq T(R_1) \leq R_1$. Let us assume that $s_k \leq R_1$, ($k = 0, 1, \dots, n$).

Introducing the notations

$$I(x) = \int_x^{t_{k+1}} w(t)dt, \quad W(x) = w(x)(t_{k+1} - x)$$

from (7) we obtain in turn

$$\begin{aligned} s_{k+1} &= t_{k+1} + \Omega(t_{k+1})[I(s_k) - W(s_k)] \leq t_{k+1} + \Omega(R_1)[I(s_k) - W(s_k)] \\ &\leq s_k + \Omega(R_1)[I(t_k) - W(s_k) - w(t_k)(s_k - t_k)] \leq s_k + \Omega(R_1)[I(t_k) - W(t_k)] \\ &\leq \dots \leq s_0 + \Omega(R_1)[I(t_0) - W(t_0)] \leq T(R_1) \leq R_1 \quad \text{by (13).} \end{aligned} \quad (17)$$

Hence, the sequences $\{t_n\}$, $\{s_n\}$ ($n \geq 0$) are bounded above by R_1 , that completes the proof of part (i).

(ii). We will show that if

$$\|y_k - x_k\| \leq s_k - t_k, \quad (18) \quad \|F(x_k)\| \leq A(w, t_{k-1}, s_{k-1}, t_k), \quad (k \geq 1) \quad (19)$$

$$\|F(y_k)\| \leq B(w, t_k, s_k), \quad (20) \quad \|F'(x_{k+1}^{-1})\| \leq \Omega(t_{k+1}), \quad (21)$$

$$\|F'(y_k)^{-1}\| \leq \Omega(s_k), \quad \text{for all } (0 \leq k \leq n) \quad (22)$$

then

$$\|x_{k+1} - y_k\| \leq t_{k+1} - t_k, \quad (23) \quad \|F(x_{k+1})\| \leq A(w, t_k, s_k, t_{k+1}) \quad (24)$$

and

$$\|y_{k+1} - x_{k+1}\| \leq s_{k+1} - t_{k+1} \text{ for all } (k \geq 0) \quad (25)$$

From (3) (for $n = 0$), (20), (2) (for $n = 0$) and the result of the first Lemma in [9] we obtain, with $\tau = 1 - t$

$$\begin{aligned} \|x_1 - y_0\| &\leq \|F'(y_0)^{-1}\| \|F(y_0)\| \leq \|F'(y_0)^{-1}\| \|F(y_0) - F(x_0) - F'(x_0)(y_0 - x_0)\| \\ &\leq \|F'(y_0)^{-1}\| \left\| \int_0^1 [F'(x_0 + t(y_0 - x_0)) - F'(x_0)](y_0 - x_0) dt \right\| \\ &\leq \Omega(s_0) \int_0^1 [w(\tau t_0 + t s_0) - w(t_0)](s_0 - t_0) dt \\ &\leq \Omega(s_0) \left[\int_0^1 w(t) dt - w(t_0)(s_0 - t_0) \right] = B(w, t_0, s_0) = t_1 - s_0. \end{aligned}$$

that (23) is true for $k = 0$. Moreover from the identity

$$F(y_k) = F(y_k) - F(x_k) - F'(x_k)(y_k - x_k) = \int_0^1 [F'(x_k + t(y_k - x_k)) - F'(x_k)](y_k - x_k) dt,$$

the condition (4) and the induction hypotheses we obtain

$$\begin{aligned} \|F(y_k)\| &= \left\| \int_0^1 [F'(x_k + t(y_k - x_k)) - F'(x_k)](y_k - x_k) dt \right\| \\ &\leq \int_0^1 [w(\tau t_k + t s_k) - w(t_k)](s_k - t_k) dt \\ &= \int_{t_k}^{s_k} w(t) dt - w(t_k)(s_k - t_k) = B(w, t_k, s_k). \end{aligned}$$

Therefore by (3) and the above

$$\|x_{k+1} - y_k\| \leq \|F'(y_k)^{-1}\| \|F(y_k)\| \leq \Omega(s_k) B(w, t_k, s_k) = t_{k+1} - s_k,$$

which shows (23).

Similarly from the approximation

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

we get

$$\begin{aligned}\|F(x_{k+1})\| &= \left\| \int_0^1 [F'(y_k + t(x_{k+1} - y_k)) - F'(y_k)](x_{k+1} - y_k) dt \right\| \\ &\leq \int_0^1 [w(\tau s_k + t t_{k+1}) - w(s_k)](t_{k+1} - s_k) dt \\ &= \int_{s_k}^{t_{k+1}} w(t) dt - w(s_k)(t_{k+1} - s_k) = A(w, t_k, s_k, t_{k+1}),\end{aligned}$$

where we have also used the estimates

$$\begin{aligned}\|x_{k+1} - x_0\| &\leq \|x_{k+1} - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \leq \|x_{k+1} - y_k\| + \|y_k - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \\ &\leq \dots \leq (t_{k+1} - s_k) + (s_k - s_0) + s_0 \leq t_{k+1} \leq R_1,\end{aligned}\quad (26)$$

$$\begin{aligned}\|y_{k+1} - x_0\| &\leq \|y_{k+1} - x_{k+1}\| + \|x_{k+1} - y_k\| + \|y_k - y_0\| + \|y_0 - x_0\| \\ &\leq \dots \leq (s_{k+1} - t_{k+1}) + (t_{k+1} - s_k) + (s_k - s_0) + s_0 \leq s_{k+1} \leq R_1.\end{aligned}\quad (27)$$

Hence, (24) is true.

From (2), (21) and (24)

$$\|y_{k+1} - x_{k+1}\| \leq \|F'(x_{k+1})^{-1}\| \|F(x_{k+1})\| \leq \Omega(t_{k+1}) A(w, t_k, s_k, t_{k+1}) = s_{k+1} - t_{k+1},$$

from which (25) now follows.

Moreover, from (4), (5), (14) and the estimate

$$\|F'(x_0)^{-1}\| \|F'(x_{k+1}) - F'(x_0)\| \leq \beta w(t_{k+1}) \leq \beta w(R_1) < 1, \quad (28)$$

it follows from the Banach lemma on invertible operators that $F'(x_{k+1})^{-1}$ exists, and

$$\|F'(x_{k+1})^{-1}\| \leq \frac{\|F'(x_0)^{-1}\|}{1 - \|F'(x_0)^{-1}\| \|F'(x_{k+1}) - F'(x_0)\|} \leq \Omega(t_{k+1}). \quad (29)$$

$$\text{Similarly, we can show } \|F'(y_k)^{-1}\| \leq \Omega(s_k) \quad (30)$$

Furthermore we can obtain the estimates

$$\|y_{n+1} - y_n\| \leq \|y_{n+1} - x_{n+1}\| + \|x_{n+1} - y_n\| \leq s_{n+1} - t_{n+1} + t_{n+1} - s_n = s_{n+1} - s_n, \quad (31)$$

$$\|x_{n+1} - x_n\| \leq \|x_{n+1} - y_n\| + \|y_n - x_n\| \leq t_{n+1} - s_n + s_n - t_n = t_{n+1} - t_n. \quad (32)$$

It now follows from the above that the sequence $\{x_n\} (n \geq 0)$ is a Cauchy sequence in a Banach space and as such it converges to some $x^* \in U(x_0, R_1)$, which by taking the limit as $n \rightarrow \infty$ in (2) becomes a zero of F since $F(x^*) = 0$.

Moreover by (26) and (27) $x_n, y_n \in U(x_0, R_1)$. The estimates (15) and (16) now follow easily from (31) and (32).

Finally to show uniqueness, we assume that there exists another zero y^* of the equation (1) in $U(x_0, R)$. Then from (4), (29) and the estimate

$$\begin{aligned}\|F'(x_0)^{-1}\| \int_0^1 \|F'[x^* + t(y^* - x^*)] - F'(x_0)\| dt &\leq \beta w(\tau\|x_0 - y^*\| + \|t\|x_0 - x^*\|) \\ &\leq \beta w(\tau R + tR_1) \leq \beta w(R) < 1\end{aligned}$$

by (14).

It now follows from the above inequality that the linear operator $\int_0^1 F'[x^* + t(y^* - x^*)] dt$ is invertible. From this fact and the approximation

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

it follows that $x^* = y^*$, that completes the proof of the theorem.

Remarks.

(a) From the estimates

$$\|x_n - y_0\| \leq \|x_n - y_n\| + \|y_n - y_0\| \leq (t_n - s_n) + s_n - s_0 \leq t_n - \eta \leq R_1 - \eta,$$

$$\begin{aligned}\|y_{n+1} - y_0\| &\leq \|y_{n+1} - x_{n+1}\| + \|x_{n+1} - y_n\| + \|y_n - y_0\| \\ &\leq (s_{n+1} - t_{n+1} + (t_{n+1} - s_n) + (s_n - s_0) \leq s_{n+1} - \eta \leq R_1 - \eta,\end{aligned}$$

it follows that $x_n, y_n \in U(y_0, R_1 - \eta)$ for all $n \geq 0$.

(b) We can use the two-point step Newton method generated by (2)-(3) to an approximate locally unique zero of nonlinear equations with nondifferentiable operators. Indeed consider the equation

$$F_1(x) = F(x) + Q(x) = 0 \quad (33)$$

with F as before and Q satisfying an estimate of the form

$$\|Q(x_1) - Q(x_2)\| \leq q_1(r)\|x_1 - x_2\| \quad \text{for all } x_1, x_2 \in U(x_0, R), \quad (34)$$

and where q_1 is a nondecreasing function on $[0, R]$. Note that the differentiability of Q is not assumed here. Let us define w_1 , for all $(0 \leq r \leq R)$, by

$$w_1 = \int_0^1 q_1 dt \quad (35)$$

Replace F in (2) and (3) by F_1 and leave the Fréchet derivatives as they are. Define new sequences $\{t_n\}, \{s_n\} (n \geq 0)$ as the corresponding ones given by (7) and (8). The only change will be an extra term of the form $w_1(s_n) - w_1(t_n)$ inserted in the brackets appearing in (7) and (8) (also added in (7)). Define also T_1 as T in (11) but add an extra form $\beta w_1(r)$ at the numerator of the expression appearing at the right hand side of (11).

Then following the proof of the above theorem step we can show a similar theorem with identical hypotheses and conclusions, but holding for equation (33) (see, also [1], [2], [4], [8], [9]).

(c) If in addition to the hypotheses of the theorem we assume that $2\beta w(R_1) \leq 1$, then for $(0 \leq \alpha_n < 1)$ and $(0 \leq \beta_n \leq 1)$

$$t_{n+1} - s_n \leq \alpha_n(s_n - t_n), \quad (36) \quad s_{n+1} - t_{n+1} \leq \beta_n(t_{n+1} - s_n), \quad (37)$$

where

$$\alpha_n = \Omega(s_n)[w(d_n) - w(t_n)], \quad (38) \quad \beta_n = \Omega(t_{n+1})[w(e_n) - w(s_n)], \quad (39)$$

for all $n \geq 0$ and $(t_n \leq d_n \leq s_n \leq e_n \leq t_{n+1})$.

Indeed, from (8), for all $n \geq 0$, and for some $t_n \leq d_n \leq s_n$

$$\begin{aligned} t_{n+1} - s_n &= \Omega(s_n) \left[\int_{t_n}^{s_n} w(t) dt - w(t_n)(s_n - t_n) \right] \\ &= \Omega(s_n)[w(d_n) - w(t_n)](s_n - t_n) \leq \alpha_n(s_n - t_n). \end{aligned}$$

Similarly, we show (37).

(d) Similar theorems can easily be proved if the term $\|x_1 - x_2\|$ in (4) (or (39)) is replaced by Holder estimate of the form $\|x_1 - x_2\|^p$ for some $p \in [0, 1)$. The details are omitted (see, also [1], [2]).

(e) If assume that $\|F'(x) - F'(y)\| \leq k\|x - y\|$ and set

$$r_1 = \frac{1 - \sqrt{1 - 2h}}{h}\eta, \quad r_2 = \frac{1 + \sqrt{1 - 2h}}{h}\eta, \quad h = K\eta\beta \leq \frac{1}{2},$$

as in [3] we can show that

$$\|x_{n+1} - y_n\| \leq t_{n+1}^1 - s_n^1 \leq r_1 - s_n^1, \quad (40) \quad \|y_{n+1} - x_{n+1}\| \leq s_{n+1}^1 - t_{n+1}^1 \leq r_1 - t_{n+1}^1, \quad (41)$$

where for all $n \geq 0$ and $s_0^1 = s_0$, $t_0^1 = t_0 = 0$, we have

$$s_n^1 = t_n^1 - \frac{g(t_n^1)}{g'(t_n^1)}, \quad (42) \quad t_{n+1}^1 = s_n^1 - \frac{g(s_n^1)}{g'(s_n^1)}, \quad (43)$$

with

$$g(t) = \frac{k}{2}t^2 - \frac{1}{\beta}t + \frac{\eta}{\beta}, \quad r_1 - t_n = \frac{(1 - \theta^2)\eta\theta^{4^n-1}}{1 - \theta^{4^n}}, \quad \theta = \frac{r_1}{r_2}, \quad \text{for all } n \geq 0. \quad (44)$$

However, if we assume that

$$\Omega(r) \left[\int_{s_0}^r w(t) dt + w(r)r \right] \leq s_1^1 - t_1^1, \quad (45) \quad \Omega(r) \left[\int_0^r w(t) dt + w(r)r \right] \leq t_1^1 - s_0^1, \quad (46)$$

for all $r \in [0, R]$, then it can easily be seen by (7), (8), (42), (43), (45), (46), that

$$s_n - t_n \leq s_n^1 - t_n^1, \quad (47) \quad t_{n+1} - s_n \leq t_{n+1}^1 - s_n^1. \quad (48)$$

The above estimates and (44) show that the order of convergence of our iterations is at least four. Indeed, if we set $w(r) = k$ for all $r \in [0, R]$ in (4), then our results can be reduced to the ones given by (40) and (41). All the above show that our results are better than the ones already in the literature for Newton and Newton-like methods [1]-[9].

Furthermore, as in Theorem 1 we can show the following extension:

Theorem 2. Let $F : D \subseteq E_1 \rightarrow E_2$ be a nonlinear operator defined on some convex subset D of a Banach space E_1 with values in a Banach space E_2 . Assume:

(a) F is Fréchet differentiable on $U(x_0, R) \subseteq D$ for some $x_0 \in D$, ($R < 0$) and satisfies the condition

$$\|F'(x+h) - F'(x)\| \leq D(r, \|h\|), \quad x \in U(x_0, r), \quad 0 \leq r \leq R, \quad \|h\| \leq R-r, \quad (49)$$

where D is a nonnegative and continuous function of two variables such that if one of the variables is fixed then D is a nondecreasing function of the other on the interval $[0, R]$. We will further assume that for a fixed $r \in [0, R]$, D can be extended such that $\|h\| \in [0,]$. Moreover the function $\frac{\partial D(0, t)}{\partial t}$ is positive, continuous and nondecreasing on $[0, R-r]$ with $D(0, 0) = 0$.

(b) The inverse of the linear operator $F'(x_0)$ exists.

(c) There exists a minimum positive number r_1 with $r_1 \leq R$, $G(r_1) \leq r_1$ which also satisfies the conditions $\beta D(0, r_1) < 1$, and

$$\Omega_0(r_1) \int_{r_1}^R D(r_1, t) dt < 1,$$

where the function $\Omega_0(x)$ is defined by the equality

$$\Omega_0(x) = \frac{\beta}{1 - \beta D(0, x)}$$

hence

$$G(r) = s_0 + \Omega_0(r) \int_0^r D(r, t) dt \quad \text{on } [0, R].$$

(d) The hypotheses of Theorem 1 are satisfied.

(c) The following conditions are true

$$D(0, t) \leq w(t) \quad \text{and} \quad D(r_2, t) \leq w(t) \quad \text{for all } t \in [0, R]$$

(i) The sequences $\{v_k\}, \{w_k\} (k \geq 0)$ given by

$$\begin{aligned} v_0 &= 0, \quad w_0 \geq \eta, \quad v_1 \geq w_0 + w_0^*, \quad w_1 \geq v_1 + w_1^*, \\ w_0^* &= \Omega_0(w_0) \int_{v_0}^{w_0} D(v_0, t) dt, \quad w_1^* = \Omega_0(v_1) \int_{w_0}^{v_1} D(w_0, t) dt, \end{aligned}$$

and for all $n \geq 0$

$$v_{n+1} = w_n + \Omega_0(w_n) \int_{v_n}^{w_n} D(v_n, t) dt, \quad w_{n+1} = v_{n+1} + \Omega_0(v_{n+1}) \int_{w_n}^{v_{n+1}} D(w_n, t) dt,$$

are monotonically increasing and bounded above by their common limit $r_2 \leq r_1$ for all $n \geq 0$.

(ii) The two-point step Newton method generated by (2)-(3) is well defined, remains in $U(x_0, r_1)$ for all $n \geq 0$, and converges to a unique zero x^* of equation $F(x) = 0$ in $U(x_0, R)$.

Moreover the following estimates are true:

$$\begin{aligned} \|x_n - x^*\| &\leq r_2 - v_n, & \|y_n - x^*\| &\leq r_2 - s_n, \\ v_{n+1} - w_n &\leq t_{n+1} - s_n, & w_{n+1} - v_{n+1} &\leq s_{n+1} - t_{n+1}, \\ v_{n+1} - v_n &\leq t_{n+1} - t_n, & w_{n+1} - w_n &\leq s_{n+1} - s_n, \\ \|x_{n+1} - y_n\| &\leq v_{n+1} - w_n, & \|y_{n+1} - x_{n+1}\| &\leq w_{n+1} - v_{n+1} \quad \text{for all } n \geq 0. \end{aligned}$$

Remarks 2.

(a) Under the hypotheses of Theorems 1 and 2 the error estimates obtained in Theorem 2 are better than the ones obtained in Theorem 1.

(b) By setting $D(r, t) = w(r)|t|$ or $D(r, t) = k|t|$, $k > 0$, $r, t \in [0, R]$ we can obtain the results in Theorem 1 and the ones in Remark (e) above respectively (see, also [2]).

(c) Under condition (49) results similar to the ones obtained in Remark 1 (a)-(e) can now easily follow.

(d) Note that r_1 is the unique positive zero of $G(r) - r = 0$ in $[0, r_1]$. Hence, $r_1 = r_2$.

(e) A choice for $D(r, \|h\|)$ can be given by

$$D(r, \|h\|) = \sup_{x, y \in U(x_0, r)} \|F'(x+h) - F'(x)\|.$$

We will then have

$$\|F'(x+h) - F'(x)\| \leq D(r, \|h\|) \leq \int_r^{r+\|h\|} q(t)dt \quad \text{for all } x, y \in U(x_0, r).$$

(f) Another choice for $D(r, \|h\|)$ can be given by

$$D(r, \|h\|) = \int_r^{r+\|h\|} q(t)dt.$$

(g) If instead of condition (49) the following are satisfied

$$\|F'(x_0)^{-1}[F'(x+h) - F'(x)]\| \leq D(r, \|h\|)$$

then all the results for Theorem 2, will still follow by just dropping β .

(h) The conditions (e) for Theorem 2 can be replaced by the weaker

$$\Omega_0(r) \int_0^r D(r, t)dt \leq \Omega(r) \int_0^r w(t)dt$$

for all $r \in [0, \max\{\tau_1, R_1\}]$.

(i) A choice for the function q can be given by

$$q(r) = \sup_{x_1, x_2 \in U(x_0, r)} \frac{\|F'(x_1) - F'(x_2)\|}{\|x_1 - x_2\|}.$$

we will then have $q(r) \leq K$ for all $r \in [0, R]$ as well as $\|F'(x_1) - F'(x_2)\| \leq q(r)\|x_1 - x_2\|$ for all $r \in [0, R]$, and $x_1, x_2 \in U(x_0, R)$.

References

- [1] Argyros, I.K.: "The Newton-Kantorovich method under mild differentiability conditions and the Pták error estimates", *Monatshefte fur Mathematik*, Vol. 109, N 3, 1991-203, (1990).
- [2] Argyros, I.K.: "On the solution of equations with nondifferentiable operators and Pták error estimates" *BIT*. 90, 752-754, (1990).
- [3] Chen, D. and Argyros, I.K.: "On the midpoint method for solving nonlinear operator equations in Banach spaces", *Appl. Math. Letters.*, Vol. 5, N 4, 7-9, (1992).
- [4] Chen, X. and Yamamoto, T.: "Convergence domains of certain iterative methods for solving nonlinear equations", *Numer. Func. Anal. and Optimiz.* 10, 1, 34-48, (1989).
- [5] Kantorovich, L.V. and Akilov, G.P.: *Functional Analysis in Normed Spaces*. Pergamon Press, New York, 1964.
- [6] Ostrowski, A.M.: *Solution of Equations in Euclidean and Banach Spaces*. Academic Press, New York, 3rd ed. (1973).
- [7] Potra, F.A. and Pták, V.: "Sharp error bounds for Newton process", *Numer. Math.* 34, 63-72, (1980).
- [8] Zabrejko, P.P. and Nguen, D.F.: "The majorant method in the theory of Newton-Kantorovich approximations and the Pták error estimates", *Numer. Func. Anal. and Optimiz.* 9, 671-684. (1987).
- [9] Zincenko, A.I.: "Some approximate methods of solving equations with nondifferentiable operators", *Dopovidi. Akad. Navk. Ukrain. RSR*. 156-161. (1963).

Estudio comparativo de familias de polinomios ortogonales relativas a la circunferencia unidad

María-José Cantero

Departamento de Matemática Aplicada. Universidad de Zaragoza

Abstract

A comparative study of several families of orthogonal polynomials on the unit circle is presented. We establish some relations between their corresponding orthogonality measures, between their Carathéodory functions and also between their Szegő functions.

1. Introducción

Consideremos una medida μ de Borel finita positiva con soporte infinito en $[0, 2\pi)$. Introducimos un producto escalar en el espacio vectorial \mathbb{P} de los polinomios con coeficientes complejos, en la forma:

$$\langle p, q \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} p(e^{i\theta}) \overline{q(e^{i\theta})} d\mu(\theta)$$

Para cada $k \in \mathbb{Z}$, definimos los momentos

$$c_k = \int_0^{2\pi} e^{-ik\theta} d\mu(\theta)$$

Sin pérdida de generalidad, podemos tomar $c_0 = 1$, es decir, μ es una medida de probabilidad en $[0, 2\pi)$.

Denotaremos mediante M la matriz de momentos relativa a μ :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & c_1 & c_2 & \cdots \\ \bar{c}_1 & 1 & c_1 & \cdots \\ \bar{c}_2 & \bar{c}_1 & 1 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}$$

Obsérvese que M es hermitiana y de Toeplitz.

Indicaremos $\Delta_n = \det M_n$, donde M_n es la matriz menor principal de M de orden $n + 1$. Como la medida μ es positiva, M es una matriz definida positiva y por tanto, se tiene $\Delta_n > 0$ para todo n .

Aplicando el procedimiento de ortonormalización de Gram-Schmidt sobre la sucesión $\{z^n\}$ se obtiene una única sucesión de polinomios ortonormales $(\phi_n)_{n=0}^\infty$ con $\phi_n(z) = \kappa_n z^n +$ términos de grado menor.

Si se designa por $\Phi_n(z) = \kappa_n^{-1} \phi_n(z)$ la correspondiente sucesión de polinomios mónicos, se introduce así una sucesión de polinomios ortogonales mónicos (SPOM), $(\Phi_n)_{n=0}^\infty$ asociada a la medida μ . Es inmediato que $\kappa_n^2 = \langle \Phi_n, \Phi_n \rangle^{-1}$

Es bien conocido (ver [7]) que los polinomios Φ_n satisfacen la relación de recurrencia

$$\Phi_n(z) = z\Phi_{n-1}(z) + \Phi_n(0)\Phi_{n-1}^*(z), \quad n = 1, 2, \dots$$

con $\Phi_0(z) = 1$, donde $\Phi_n^*(z) = z^n \overline{\Phi_n(z^{-1})}$ es el denominado polinomio recíproco de Φ_n . Además, si $\Phi_n(0) \neq 0$, también se cumple la relación de recurrencia a tres términos

$$\Phi_n(0)\Phi_{n+1}(z) = (\Phi_n(0)z + \Phi_{n+1}(0))\Phi_n(z) - \Phi_{n+1}(0)(1 - |\Phi_n(0)|^2)z\Phi_{n-1}(z) \quad (1)$$

Los valores de los polinomios en el origen $\Phi_n(0)$ se denominan parámetros de Schur o coeficientes de reflexión.

Un sencillo cálculo (ver, por ejemplo, [5]) proporciona

$$1 - |\Phi_n(0)|^2 = \frac{\Delta_n \Delta_{n-2}}{\Delta_{n-1}^2} \quad (2)$$

y, como consecuencia, $|\Phi_n(0)| < 1$. También se sigue de aquí que

$$\Delta_n = \Delta_{n-1} \prod_{j=1}^n (1 - |\Phi_j(0)|^2) \text{ y que } \kappa_n = (\Delta_{n-1}/\Delta_n)^{1/2}.$$

Recíprocamente, dada una sucesión de números complejos, $(a_n)_{n=1}^\infty$ con $|a_n| < 1$, $n = 1, 2, \dots$, existe una única medida μ , de forma que $a_n = \Phi_n(0)$, siendo $(\Phi_n)_{n=0}^\infty$ la SPOM respecto de μ . Con esto, cualquier sucesión $(a_n)_{n=1}^\infty \subset \mathbb{D} = \{z \in \mathbb{C}; |z| < 1\}$ es una sucesión de parámetros de Schur.

Por otra parte, si se considera la ecuación en diferencias

$$a_n y_{n+1}(z) = (a_n z + a_{n+1}) y_n(z) - a_{n+1} (1 - |a_n|^2) z y_{n-1}(z)$$

el conjunto de soluciones es un espacio vectorial de dimensión dos. Una de las soluciones es (Φ_n) . Una segunda solución linealmente independiente (Ω_n) aparece cuando se consideran las condiciones iniciales:

$$\begin{aligned}y_0(z) &= 1 \\y_1(z) &= z - a_1\end{aligned}$$

Esto significa que $\Omega_n(0) = -a_n$ y, como consecuencia, $(\Omega_n)_{n=0}^\infty$ es una SPOM respecto de una cierta medida ν . Tal sucesión se denomina SPOM de segunda especie respecto de μ y viene dada explícitamente en la forma (ver [2] y [6]).

$$\begin{aligned}\Omega_n(z) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{e^{i\theta} + z}{e^{i\theta} - z} [\Phi_n(e^{i\theta}) - \Phi_n(z)] d\mu(\theta) \\ \Omega_0(z) &= 1\end{aligned}$$

Asociada a la medida μ puede definirse una función F , analítica en \mathbb{D} con $\operatorname{Re} F(z) > 0$ para $z \in \mathbb{D}$, de modo que

$$F(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{e^{i\theta} + z}{e^{i\theta} - z} d\mu(\theta)$$

Puede comprobarse que

$$F(z) = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \bar{c}_n z^n, \quad z \in \mathbb{D}$$

En la literatura, F es conocida como función de Carathéodory o C-función.

Señalemos que se dice que la medida μ pertenece a la clase de Szegő si su parte absolutamente continua μ' cumple que $\log \mu' \in L^1[0, 2\pi)$, lo que equivale a que $(\Phi_n(0))_{n=0}^\infty \in l_2$, (ver [5]). En este caso puede definirse la función de Szegő como

$$D(z; \mu) = \exp \left\{ \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1 + ze^{-i\theta}}{1 - ze^{-i\theta}} \log \mu'(\theta) d\theta \right\}, \quad z \in \mathbb{D}.$$

Además se tiene, uniformemente en \mathbb{D}

$$D(z; \mu) = \lim_n \frac{\kappa_n}{\Phi_n^*(z)} \quad (3)$$

Finalmente, recordemos que asociado a una SPOM puede definirse el n -núcleo como el polinomio en dos variables

$$K_n(z, y) = \sum_{j=0}^n \kappa_j^2 \Phi_j(z) \overline{\Phi_j(y)}.$$

El núcleo está relacionado con los polinomios ortogonales mediante: $K_n(z, 0) = \kappa_n^2 \Phi_n^*(z)$.

Estamos interesados en el estudio de relaciones entre familias de polinomios ortogonales, obtenidas unas de otras mediante ciertas modificaciones de los parámetros de Schur. Nos ocuparemos, así mismo de las relaciones existentes entre las correspondientes funciones de Carathéodory y de Szegő. Para ello, partiremos de una sucesión de parámetros de Schur $(\Phi_n(0))_{n=0}^\infty$ y consideraremos las sucesiones $(-\Phi_n(0))_{n=0}^\infty$, $(e^{i\varphi}\Phi_n(0))_{n=0}^\infty$ y $(-e^{i\varphi}\Phi_n(0))_{n=0}^\infty$, que también son sucesiones de parámetros de Schur. Denotaremos los correspondientes polinomios ortogonales, sus núcleos y las medidas de ortogonalidad en la forma

Parámetros	Polinomios	Núcleos	Medidas
$\Phi_n(0)$	$\Phi_n(z) = \Phi_n(z, 0)$	$K_n(z, y)$	μ
$-\Phi_n(0)$	$\Omega_n(z) = \Phi_n(z, \pi)$	$L_n(z, y)$	ν
$e^{i\varphi}\Phi_n(0)$	$R_n(z) = \Phi_n(z, \varphi)$	$M_n(z, y)$	μ_φ
$-e^{i\varphi}\Phi_n(0)$	$S_n(z) = \Phi_n(z, \varphi + \pi)$	$N_n(z, y)$	ν_φ

y realizaremos un estudio comparativo entre las mencionadas familias de polinomios ortogonales, extendiendo resultados obtenidos en [1] y [3].

2. Relaciones entre las sucesiones de polinomios ortogonales

Como $|\Phi_n(0)| = |-\Phi_n(0)| = |e^{i\varphi}\Phi_n(0)| = |-e^{i\varphi}\Phi_n(0)|$, por (2), los determinantes de la matriz de momentos y los coeficientes conductores de los correspondientes polinomios ortonormales son los mismos para las cuatro sucesiones de polinomios ortogonales.

En [4] se han obtenido relaciones entre las SPOM (Φ_n) y (Ω_n) (Proposición 4.2) y así mismo entre las sucesiones (Φ_n) y (R_n) (Proposición 4.1). Siguiendo un procedimiento análogo para (Φ_n) y (S_n) , aplicando las fórmulas (3) y (4) de [4], resulta fácilmente

$$\kappa_{n-1}^2 [S_n(z)\Phi_{n-1}(z) - \Phi_n(z)S_{n-1}(z)] = -\Phi_n(0) [e^{i\varphi}\Phi_{n-1}(z)N_{n-1}(z, 0) + S_{n-1}(z)K_{n-1}(z, 0)]$$

y

$$S_n(z)K_{n-1}(z, 0) + e^{i\varphi}\Phi_n(z)N_{n-1}(z, 0) = z [S_{n-1}(z)K_{n-1}(z, 0) + e^{i\varphi}\Phi_{n-1}(z)N_{n-1}(z, 0)].$$

Además se verifica la siguiente proposición:

2.1 Proposición Los polinomios (Φ_n) y (S_n) satisfacen las igualdades:

- (i) $e^{i\varphi} \Phi_n(z) N_n(z, 0) + S_n(z) K_n(z, 0) = e^{i\varphi} \Phi_n(z) N_{n-1}(z, 0) + S_n(z) K_{n-1}(z, 0) = (e^{i\varphi} + 1) z^n$
- (ii) $S_{n-1}(z) \Phi_n(z) - \Phi_{n-1}(z) S_n(z) = \kappa_{n-1}^{-2} \Phi_n(0) (e^{i\varphi} + 1) z^{n-1}$
- (iii) $e^{i\varphi} S_{n-1}(z) K_n(z, 0) + \Phi_{n-1}(z) N_n(z, 0) = \kappa_{n-1}^{-2} \kappa_n^2 (e^{-i\varphi} + 1) z^{n-1}$
- (iv) $K_{n-1}(z, 0) N_n(z, 0) - N_{n-1}(z, 0) K_n(z, 0) = \kappa_n^2 \overline{\Phi_n(0)} (e^{-i\varphi} + 1) z^n$

Demostración. Análoga a la demostración de la Proposición 4.1 en [4]. ∞

Así quedan completadas las fórmulas que relacionan la SMOP $(\Phi_n)_{n=0}^\infty$ con las sucesiones $(\Omega_n)_{n=0}^\infty$, $(R_n)_{n=0}^\infty$ y $(S_n)_{n=0}^\infty$.

Nuestro propósito es, ahora, obtener relaciones entre las cuatro sucesiones de polinomios ortogonales con vistas a deducir alguna información acerca de la medida de ortogonalidad μ_φ relativa a $(R_n)_{n=0}^\infty$, a partir de la medida μ asociada a la SPOM $(\Phi_n)_{n=0}^\infty$.

2.2 Proposición

Las sucesiones de polinomios ortogonales $(\Phi_n)_{n=0}^\infty$, $(\Omega_n)_{n=0}^\infty$, $(R_n)_{n=0}^\infty$ y $(S_n)_{n=0}^\infty$ satisfacen la ecuación en diferencias finitas

$$a_n y_{n+1}(z) - (a_n z + a_{n+1}) y_n(z) + a_{n+1} (1 - |a_n|^2) z y_{n-1}(z) = 0$$

Demostración. Basta tener en cuenta que la ecuación anterior no varía si se multiplican los parámetros a_n , $\forall n \in \mathbb{N}$ por una constante de módulo uno y que la sucesión $(\Phi_n)_{n=0}^\infty$ es solución ya que verifica la fórmula de recurrencia (1). ∞

Así, las cuatro sucesiones de polinomios ortogonales verifican la misma fórmula de recurrencia a tres términos (1), variando las condiciones iniciales.

Nota. Obsérvese que si para algún valor de n , se tiene $\Phi_n(0) = 0$, entonces la ecuación en diferencias anterior se convierte en $0 = a_{n+1} [y_n(z) - z y_{n-1}(z)]$, lo que corresponde a que en ese caso, $\Phi_n(z) = z \Phi_{n-1}(z)$.

Como Φ_n y Ω_n son solución de una ecuación en diferencias de segundo orden y coeficientes no constantes y los polinomios R_n son solución de la misma ecuación, éstos

deberán ser combinación lineal de aquéllos:

$$R_n(z) = a\Phi_n(z) + b\Omega_n(z).$$

Comparando los coeficientes conductores y los términos independientes, se tiene

$$a + b = 1$$

$$a - b = e^{i\varphi}$$

de esta forma

$$R_n(z) = e^{i\frac{\varphi}{2}} \left\{ \cos \frac{\varphi}{2} \Phi_n(z) - i \sin \frac{\varphi}{2} \Omega_n(z) \right\}. \quad (4)$$

Pasando a polinomios recíprocos en la ecuación anterior, resulta para los núcleos:

$$M_n(z, 0) = e^{-i\frac{\varphi}{2}} \left\{ \cos \frac{\varphi}{2} K_n(z, 0) + i \sin \frac{\varphi}{2} L_n(z, 0) \right\}. \quad (5)$$

Podemos proceder análogamente con la sucesión S_n que también verifica:

$$S_n(z) = a_1\Phi_n(z) + b_1\Omega_n(z)$$

Comparando, de nuevo, los coeficientes conductores y los términos independientes:

$$a_1 + b_1 = 1$$

$$a_1 - b_1 = -e^{i\varphi}$$

de donde

$$S_n(z) = e^{i\frac{\varphi}{2}} \left\{ -i \sin \frac{\varphi}{2} \Phi_n(z) + \cos \frac{\varphi}{2} \Omega_n(z) \right\} \quad (6)$$

y

$$N_n(z, 0) = e^{-i\frac{\varphi}{2}} \left\{ i \sin \frac{\varphi}{2} K_n(z, 0) + \cos \frac{\varphi}{2} L_n(z, 0) \right\}. \quad (7)$$

De (4) y (6), se tiene

$$R_n(z) + S_n(z) = \Phi_n(z) + \Omega_n(z)$$

y

$$|R_n(z)|^2 + |S_n(z)|^2 = |\Phi_n(z)|^2 + |\Omega_n(z)|^2.$$

Por otra parte, de (5) y (7), se sigue

$$M_n(z, 0) + N_n(z, 0) = K_n(z, 0) + L_n(z, 0) \quad (8)$$

y

$$|M_n(z, 0)|^2 + |N_n(z, 0)|^2 = |K_n(z, 0)|^2 + |L_n(z, 0)|^2. \quad (9)$$

3. Medidas de Ortogonalidad. Funciones de Carathéodory y de Szegő.

A partir de las relaciones anteriores, vamos a tratar de obtener información sobre la medida de ortogonalidad μ_φ asociada a la SPOM $(R_n)_{n=0}^\infty$ a partir de la medida μ , así como de la correspondiente función F_φ en relación con F , donde mediante F y F_φ denotamos las funciones de Carathéodory correspondientes a la medidas μ y μu_φ , respectivamente.

Comenzaremos exponiendo algunos resultados que necesitaremos más adelante y que pueden verse en [3] y [5].

Para cada $n \in \mathbb{N}$, se define la medida de probabilidad en $[0, 2\pi)$:

$$d\mu_n(\theta) = \frac{1}{2\pi\kappa_n^2} \frac{d\theta}{|\Phi_n(e^{i\theta})|^2} = \frac{\kappa_n^2 d\theta}{2\pi|K_n(e^{i\theta}, 0)|^2}.$$

Se demuestra que la sucesión de medidas μ_n converge débilmente a μ .

Por otra parte, si denotamos con F_n , la función de Carathéodory asociada a μ_n , resulta que $F_n(z) = \frac{L_n(z, 0)}{K_n(z, 0)}$, $z \in \mathbb{D}$. Además, la sucesión (F_n) converge a F , uniformemente sobre compactos de \mathbb{D} y $\text{Re} F_n$ posee extensión radial a casi todo punto de \mathbb{T} , que viene dada por

$$\text{Re} F_n(e^{i\theta}) = \lim_{r \rightarrow 1^-} \text{Re} F_n(re^{i\theta}) = \frac{1}{2\pi\kappa_n^2 |\Phi_n(e^{i\theta})|^2}.$$

Así, se tiene que $\mu'_n(\theta) = \text{Re} F_n(e^{i\theta})$, en casi todo punto de \mathbb{T} .

3.1 Proposición.

La parte absolutamente continua de la medida $(\mu_\varphi)'_n$ está relacionada con la correspondiente a μ_n , mediante

$$\mu'_n(\theta) = \left| \cos \frac{\varphi}{2} + i \sin \frac{\varphi}{2} F_n(e^{i\theta}) \right|^2 (\mu_\varphi)'_n(\theta),$$

siendo válida la igualdad en casi todo punto de $[0, 2\pi)$.

Demostración

Según los resultados anteriores y (5), se verifica

$$\begin{aligned} (\mu_\varphi)'_n(\theta) &= \frac{\kappa_n^2}{2\pi} |M_n(e^{i\theta}, 0)|^{-2} = \frac{\kappa_n^2}{2\pi} \left| \cos \frac{\varphi}{2} K_n(e^{i\theta}, 0) + i \sin \frac{\varphi}{2} L_n(e^{i\theta}, 0) \right|^{-2} = \\ &= \frac{\kappa_n^2}{2\pi} |K_n(e^{i\theta}, 0)|^{-2} \left| \cos \frac{\varphi}{2} + i \sin \frac{\varphi}{2} F_n(e^{i\theta}) \right|^{-2} = \left| \cos \frac{\varphi}{2} + i \sin \frac{\varphi}{2} F_n(e^{i\theta}) \right|^{-2} \mu'_n(\theta), \end{aligned}$$

de donde se sigue el enunciado. ∞

Además, si en (9) tomamos $z = \rho e^{i\theta}$ y hacemos $\rho \rightarrow 1^-$, teniendo presente los resultados antes citados, deducimos que las medidas de ortogonalidad $(\mu_\varphi)_n$, $(\nu_\varphi)_n$, μ_n y ν_n están relacionadas mediante

$$\frac{1}{(\mu_\varphi)_n'(\theta)} + \frac{1}{(\nu_\varphi)_n'(\theta)} = \frac{1}{\mu_n'(\theta)} + \frac{1}{\nu_n'(\theta)}$$

para casi todo $\theta \in [0, 2\pi)$.

Como $(S_n)_{n=0}^\infty$ es la sucesión de polinomios ortogonales de segunda especie con respecto a $(R_n)_{n=0}^\infty$, utilizando los resultados anteriores podemos establecer la siguiente relación entre F_φ y F :

3.2 Proposición

Las funciones F_φ son transformaciones lineales de F , dependientes de φ . Más precisamente,

$$F_\varphi(z) = \frac{\cos \frac{\varphi}{2} F(z) + i \sin \frac{\varphi}{2}}{i \sin \frac{\varphi}{2} F(z) + \cos \frac{\varphi}{2}} \quad z \in \mathbb{D}.$$

Demostración

Si designamos por $(F_\varphi)_n$ la función de Carathéodory correspondiente a $(\mu_\varphi)_n$, sabemos que se verifica

$$(F_\varphi)_n(z) = \frac{N_n(z, 0)}{M_n(z, 0)}.$$

De donde, teniendo en cuenta (5) y (7)

$$(F_\varphi)_n(z) = \frac{N_n(z, 0)}{M_n(z, 0)} = \frac{e^{-i\frac{\varphi}{2}} \left\{ \cos \frac{\varphi}{2} L_n(z, 0) + i \sin \frac{\varphi}{2} K_n(z, 0) \right\}}{e^{-i\frac{\varphi}{2}} \left\{ \cos \frac{\varphi}{2} K_n(z, 0) + i \sin \frac{\varphi}{2} L_n(z, 0) \right\}} = \frac{\cos \frac{\varphi}{2} F_n(z) + i \sin \frac{\varphi}{2}}{i \sin \frac{\varphi}{2} F_n(z) + \cos \frac{\varphi}{2}}.$$

Obsérvese que el denominador de esta expresión no se anula en \mathbb{D} , ya que $\operatorname{Re} F(z) > 0$ en \mathbb{D} . Ahora basta recordar que $(F_\varphi)_n$ y F_n convergen, respectivamente a F_φ y F uniformemente en compactos de \mathbb{D} . ∞

A partir de este resultado, se puede extender el obtenido en la Proposición 3.1. Para ello, basta tener en cuenta que $\mu'(\theta) = \operatorname{Re} F(e^{i\theta})$, en casi todo punto de $[0, 2\pi)$, por lo que se cumple

3.3 Proposición

La parte absolutamente continua de la medida μ'_φ está relacionada con la correspondiente a μ , mediante

$$\mu'(\theta) = \left| \cos \frac{\varphi}{2} + i \sin \frac{\varphi}{2} F(e^{i\theta}) \right|^2 \mu'_\varphi(\theta),$$

siendo válida la igualdad en casi todo punto de $[0, 2\pi)$.

Finalmente obtendremos relaciones entre las correspondientes funciones de Carathéodory y de Szegő.

3.4 Proposición

Las funciones de Szegő asociadas a las medidas μ , ν , μ_φ y ν_φ verifican las expresiones:

$$(i) \quad D(z; \mu_\varphi) = e^{i\frac{\varphi}{2}} \left\{ \cos \frac{\varphi}{2} D(z; \mu)^{-1} + i \sin \frac{\varphi}{2} D(z; \nu)^{-1} \right\}^{-1}.$$

$$(ii) \quad D(z; \nu_\varphi) = e^{i\frac{\varphi}{2}} \left\{ i \sin \frac{\varphi}{2} D(z; \mu)^{-1} + \cos \frac{\varphi}{2} D(z; \nu)^{-1} \right\}^{-1}.$$

En particular,

$$(iii) \quad \frac{1}{D(z; \mu_\varphi)} + \frac{1}{D(z; \nu_\varphi)} = \frac{1}{D(z; \mu)} + \frac{1}{D(z; \nu)}.$$

Demostración. (i) y (ii) son consecuencia inmediata de (3), (5) y (7), mientras que (iii) se sigue de (i) y (ii). ∞

Referencias

- [1] ALFARO, M.; ALFARO, M.P.; GUADALUPE, J.J.; VIGIL, L., *Correspondence entre suites de polynômes orthogonaux et fonctions de la boule unité de $H_0^\infty(D)$* , en Lecture Notes in Math., vol. 1171, Springer-Verlag, Berlín, 1985, 158-163.
- [2] ALFARO, M.; MARCELLAN, F., *Carathéodory functions and orthogonal polynomials on the unit circle*, en Complex methods in approximation theory (Almería, 1995), 1-22. Eds. A. Martínez-Finkelshtein, F. Marcellán y J.J. Moreno-Balcázar. Monogr. Cienc. Tecnol. 2, Almería, 1997.
- [3] CANTERO, M.J.; "Polinomios ortogonales sobre la circunferencia unidad. Modificaciones de los parámetros de Schur," Tesis Doctoral. Publicaciones del Seminario Matemático García de Galdeano. Zaragoza, 1997.
- [4] CANTERO, M.J.; *Algunas recurrencias en la teoría de polinomios ortogonales sobre la circunferencia unidad*, Rev. Acad. Ci. Zaragoza 53 (1998), 179-189.
- [5] GERONIMUS, Y.L., "Polynomials Orthogonal on a Circle and their Applications", Amer. Math. Soc. Transl. 3 (1962), 1-78.

- [6] PEHERSTORFER, F.; STEINBAUER, R., *Perturbation of orthogonal polynomials on the unit circle - a survey*, en "Orthogonal Polynomials on the unit circle: theory and applications", (Madrid, 1994), 97-119, Univ. Carlos III Madrid, Leganés, 1994.
- [7] SZEGÖ, G., "Orthogonal polynomials", Amer. Math. Soc. Colloq. Pub. 23 (cuarta ed.), Nueva York, 1975.

Cálculo Fraccionario y el Problema Abstracto de Cauchy

Pedro J. Miana

Departamento de Matemáticas. Universidad de Zaragoza.

pjmiana@posta.unizar.es

November 29, 1999

Abstract

In this paper we treat the deep connexion between fractional calculus and integrated semigroup. We expose some recent results in the theory for integrated semigroups and its relationship with fractional calculus, differential equations, functional calculus, Smooth Distribution Semigroup and Fractional Powers of its Infinitesimal Generator.

1. Introducción: el Problema de la Isocrona y el Cálculo Fraccionario

1.1 El Problema de la Isocrona

En 1823, el matemático Niels Henrik Abel aplicando técnicas de integración fraccionaria consiguió resolver de una forma sencilla y elegante el problema conocido como el problema de la curva *isocrona* o *tautocrona*. Este problema ya había sido tratado y resuelto por varios matemáticos anteriores a Abel, entre ellos Huygens que cien años antes de Abel, usó la curva isocrona para construir un péndulo cicloidal.

La formulación de este problema es la siguiente: *encontrar en el plano vertical una trayectoria de modo que toda partícula que se deslice por esta trayectoria sin rozamiento y bajo la acción de la gravedad tarde un tiempo prefijado T independientemente de la altura del punto de partida.*

Este problema no hay que confundirlo con el famoso problema de la *braquistocrona*, que ya fue planteado por Galileo en 1630. Este segundo problema trata de encontrar la curva o trayectoria entre dos puntos P y Q situados en un plano vertical tal que el tiempo de descenso de una partícula bajo la acción de la gravedad entre estos dos puntos sea mínimo. Fue uno de los Bernouilli, exactamente Johann Bernouilli, quien en 1696 formuló y resolvió el problema siendo la solución una cicloide.

Pero volvamos al problema de la isocrona y busquemos su formulación matemática. Fijemos el punto del origen O como punto final de la trayectoria. Consideremos dos puntos $P(x), Q(y)$

de alturas verticales x, y con $x > y$ y que pertenezcan a la curva. Si la partícula es soltada en P , al llegar a Q , su velocidad, al igualar energías, es $v = \sqrt{2g(x-y)}$. Si denotamos por $s(x)$ la longitud de arco de la curva entre el punto P y O entonces

$$T = \int_0^x \frac{s'(y)}{\sqrt{2g(x-y)}} dy = (\sqrt{2g})^{-1} \int_0^x s'(y)(x-y)^{-1/2} dy.$$

Así considerado, resolver el problema de la isocrona es resolver una ecuación integral. En el siguiente punto desarrollaremos dos de las distintas integrales fraccionarias.

1.2 Integración y Derivación Fraccionaria de Weyl y de Riemann-Liouville

Denotaremos por \mathcal{D}_+ el conjunto de funciones de soporte compacto en $[0, \infty)$ e indefinidamente derivable, $\mathcal{D}_+ \equiv C_c^\infty([0, \infty))$.

DEFINICIÓN 1.1. Dada $F \in \mathcal{D}_+$ se define la *integral fraccionaria de Weyl* de F de orden $\alpha > 0$ por

$$W^{-\alpha} F(u) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_u^\infty (t-u)^{\alpha-1} F(t) dt$$

con $\alpha > 0$ y $u \geq 0$. Este operador $W^{-\alpha} : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D}$ es inyectivo y suprayectivo. Su inversa, W^α , es llamada la *derivada fraccionaria de Weyl* (de F) of order α , véase [8], [18].

Algunas propiedades del operador integral/derivación de Weyl se citan en la siguiente proposición [8], [13].

PROPOSICIÓN 1.2. Dada $F, G \in \mathcal{D}_+$

- si $\alpha \in \mathbb{N}$ entonces $W^\alpha f = (-1)^\alpha f^{(\alpha)}$.
- $W^{\alpha+\beta} = W^\alpha W^\beta$ con $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ y si $\alpha = 0$ entonces $W^0 = Id$, el operador identidad.
- $\Gamma(\alpha) W^\alpha (F * G)(s) = \int_0^s W^\alpha G(r) \int_{s-r}^\infty (t+r-s)^{\alpha-1} W^\alpha F(t) dt dr$
 $- \int_s^\infty W^\alpha G(r) \int_s^\infty (t+r-s)^{\alpha-1} W^\alpha F(t) dt dr.$

Si denotamos por $AC^{(\alpha)}(e^{\omega t})$ con $\omega > 0$ la clausura de \mathcal{D}_+ en la norma

$$\|F\|_{\alpha, \omega} := \int_0^\infty e^{\omega t} |W^\alpha F(t)| dt$$

por la Proposición 1.2.(iii) $AC^{(\alpha)}(e^{\omega t})$ es una álgebra de Banach cuyo producto es la convolución.

REMARK. W^α con $\alpha \in \mathbb{R}$ se extiende a \mathcal{S} , $W^\alpha : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$, donde \mathcal{S} es el conjunto de $C^{(\infty)}$ -funciones en $[0, \infty)$ que cumplen

$$p_{m,n}(f) := \sup_{t \in [0, \infty)} \left| t^m \frac{d^n}{dt^n} f(t) \right| < \infty$$

para todo $m, n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Además $\{e_z\}_{z>0} \subset \mathcal{S}$ donde $e_z(t) = e^{-zt}$. $\{p_{m,n}\}_{m,n \in \mathbb{N} \cup \{0\}}$ es una familia contable de seminormas y $(\mathcal{S}, \{p_{m,n}\})$ es un espacio de Frechét. Su dual, \mathcal{S}' , es el conjunto de las distribuciones temperadas en $[0, \infty)$.

DEFINICIÓN 1.3. Dada $F \in \mathcal{D}_+$ se define la *integral fraccionaria de Riemann-Liouville* de orden $\alpha > 0$

$$D^{-\alpha}F(t) := \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} F(s) ds.$$

con $t \geq 0$, [15], [18]. Si $\alpha = n$ la derivada de Riemann-Liouville de orden n , D^n , es la derivada clásica. Si $\alpha \in \mathbb{R}^+ \setminus \mathbb{N}$ se define la *derivada fraccionaria de Riemann-Liouville* de orden α como

$$D^\alpha F(t) := \frac{d^{[\alpha]+1}}{dt^{[\alpha]+1}} (D^{-(\alpha+1-[\alpha])} F)(t).$$

Algunas propiedades de la derivada/integral de Riemann-Liouville son enunciadas en la siguiente proposición [5], [15].

PROPOSICIÓN 1.4. Sea $F \in \mathcal{D}_+$ entonces

$$- D^{-\alpha} D^{-\beta} F(t) = D^{-(\alpha+\beta)} F(t) \text{ para } t \geq 0 \text{ y } \alpha, \beta \geq 0.$$

$$- \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} D^{-\alpha} F(t) = F(t), \text{ para } t \geq 0.$$

NOTA. En general, es falso $D^\alpha D^\beta F(t) = D^{\alpha+\beta} F(t)$ con $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ pero en particular si $F^{(j)}(0) = 0$ con $j \in \{0, 1, \dots, [\alpha]\}$ entonces $D^{-\alpha} D^\alpha F(t) = F(t)$ para $t \geq 0$.

Una relación interesante entre la derivada fraccionaria de Weyl de orden α y la integración fraccionaria de Riemann-Liouville del mismo orden viene expresada a través de la transformada de Laplace: sea $F \in \mathcal{D}_+$ entonces

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(F)(z) &= \int_0^\infty e^{-zt} F(t) dt = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty e^{-zt} \int_t^\infty (s-t)^{\alpha-1} W^\alpha F(s) ds dt \\ &= \int_0^\infty W^\alpha F(s) \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^s (s-t)^{\alpha-1} e^{-zt} dt ds = \int_0^\infty W^\alpha F(s) D^{-\alpha} e_z(s) ds. \end{aligned}$$

1.3 Resolución del Problema de la Isocrona

Volvamos al problema de la ecuación de la isocrona

$$\begin{cases} T = (\sqrt{2g})^{-1} \int_0^x s'(y)(x-y)^{-1/2} dy, \\ s(0) = 0. \end{cases}$$

para $x \geq 0$. Planteada en términos de integral fraccionaria de Riemann-Liouville se obtiene $T = (\sqrt{2g})^{-1} \Gamma(1/2) D^{-1/2}(s')(x)$ para todo $x \geq 0$ y por tanto

$$D^{-1/2}(T)(x) = (\sqrt{2g})^{-1} \Gamma(1/2) D^{-1}(s')(x) = (\sqrt{2g})^{-1} \Gamma(1/2) s(x)$$

y por tanto $s(x) = 2T\pi^{-1}\sqrt{2gx}$.

Además, se puede determinar las ecuaciones paramétricas de la curva isocrona (ver [15]):

$$\begin{cases} x = a(\theta + \sin \theta), \\ y = a(1 - \cos \theta), \end{cases}$$

con $a = gT^2/\pi^2$ que geoméricamente representa la trayectoria de un punto de una circunferencia de radio a y centro $(0, a)$ y que gira sin deslizar sobre la recta horizontal $y = a$.

2. El Problema Abstracto de Cauchy

Es bien conocido en Análisis Funcional (ver, por ejemplo, [16],[19]) que una familia de acotados operadores $\{T(t)\}_{t \geq 0}$ sobre un espacio de Banach X es un C_0 -semigrupo o un semigrupo de operadores fuertemente continuos generado por $(A, D(A))$ si

- $T(t+s)x = T(t)T(s)x$ para todo $x \in X$ y $t, s \geq 0$.
- $T(0)x = x$ para todo $x \in X$.
- $t \rightarrow T(t)x$ es continua para todo $x \in X$ y para todo $t \geq 0$.
- $D(A) = \{x \in X \text{ existe } \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{T(t)x - x}{t}\}$ y $A(x) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{T(t)x - x}{t}$

El operador $(A, D(A))$ se llama *generador infinitesimal* del semigrupo $\{T(t)\}_{t \geq 0}$. Algunas propiedades de C_0 -semigrupos son enunciadas en la siguiente proposición [16], [19]:

PROPOSICIÓN 2.1. Sea $\{T(t)\}_{t \geq 0} \subset \mathcal{L}(X)$ un C_0 -semigrupo y $(A, D(A))$ su generador infinitesimal entonces

- $(A, D(A))$ es un operador cerrado y densamente definido.
- existe $M, \omega \geq 0$ tal que $\|T(t)\| \leq Me^{\omega t}$ para $t \geq 0$.
- $(\lambda - A)^{-1}x = \int_0^\infty e^{-\lambda t} T(t)x dt$ para todo $\lambda \in \mathbb{C}$ con $\Re \lambda > \omega$.

La teoría de semigrupo de operadores se encuentra íntimamente ligada al Problema Abstracto de Cauchy. Pasemos a enunciar este problema.

PROBLEMA ABSTRACTO DE CAUCHY. Sea X un espacio de Banach y $(A, D(A))$ un operador cerrado y densamente definido. Hallar la solución del problema de valor inicial

$$\begin{cases} u'(t) = A(u(t)), & t \geq 0, \\ u(0) = x, \end{cases}$$

con $x \in X$

Por solución en el Problema Abstracto de Cauchy se entiende una función $u : [0, \infty) \rightarrow X$ continua para $t \geq 0$ y diferenciable para $t > 0$.

El Teorema de Hille-Yosida (1948) caracteriza a aquellos Problemas Abstractos de Cauchy (claro está, en términos del operador $(A, D(A))$) para los cuales el problema está "bien planteado", esto es, existe solución [16],[19].

TEOREMA DE HILLE-YOSIDA. El Problema Abstracto de Cauchy

$$\begin{cases} u'(t) = A(u(t)), & t \geq 0, \\ u(0) = x, \end{cases}$$

está bien planteado si y solamente si A genera un C_0 -semigrupo $\{T(t)\}_{t \geq 0} \subset \mathcal{L}(X)$ y además la única solución está dada por $u(t) = T(t)x$ para todo $x \in X$.

Este resultado muestra que $T(t)x \equiv e^{tA}x$. De hecho, esta expresión tiene sentido si A es un número o si A es un operador acotado entendiendo por $e^{tA}x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n A^n(x)}{n!}$. Para un operador no acotado A densamente definido esta serie converge en X para todo $x \in D(A^\infty) = \bigcap_{n=1}^{\infty} D(A^n)$.

Es natural preguntarse por la solución de otras ecuaciones diferenciales abstractas y si la teoría de semigrupos puede ser aplicada para obtener esta solución; solución que tal vez se pueda expresar en una serie de potencias.

Incluso en el sencillo Problema Abstracto de Cauchy, operadores clásicos no definen C_0 -semigrupos en los espacios de Banach considerados. Así, Hörmander [11] en 1960, probó que $i\Delta$ es el generador infinitesimal de un C_0 -semigrupo de operadores en $L^p(\mathbb{R})$ si y solamente si $p = 2$, donde Δ representa al Laplaciano de \mathbb{R} .

A pesar de que el operador A en el espacio de Banach X no sea el generador infinitesimal de un C_0 -semigrupo de operadores, podemos interesarnos para qué elementos $x \in X$ existe solución al problema de valor inicial

$$\begin{cases} u'(t) = A(u(t)), & t \geq 0, \\ u(0) = x. \end{cases}$$

Los semigrupos integrados definidos en el siguiente párrafo darán solución a este punto.

3. Semigrupos Integrados

Sea $\{T_0(t)\}_{t \geq 0} \subset \mathcal{L}(X)$ un C_0 semigrupos de operadores y para todo $\alpha > 0$ se definen la familia de operadores acotados $\{T_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ mediante

$$T_\alpha(t) := \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} T_0(s) ds.$$

$\{T_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ verifica las siguientes propiedades

$$(I1) \quad T_\alpha(0) = 0.$$

$$(I2) \quad T_\alpha(t)T_\alpha(s) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left(\int_t^{t+s} (t+s-r)^{\alpha-1} T_\alpha(r) dr - \int_0^s (t+s-r)^{\alpha-1} T_\alpha(r) dr \right) \text{ con } t, s \geq 0.$$

$$(I3) \quad t \rightarrow T_\alpha(t)x \text{ es continua para todo } x \in X \text{ y } t \geq 0.$$

$$(I4) \quad \|T_\alpha(t)\| \leq M e^{\omega t} \text{ para todo } t \geq 0.$$

Estas cuatro propiedades son las que se utilizan para definir un *semigrupo de operadores α -veces integrado*. Así, $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0} \subset \mathcal{L}(X)$ es un semigrupo α -veces integrado de tipo exponencial ω si satisface (I1), (I2), (I3), e (I4) (ver por ejemplo [9], [14]). La condición (I2) es equivalente (utilizando transformada de Laplace) a que

$$R(\lambda) = \lambda^\alpha \int_0^\infty e^{-\lambda t} S_\alpha(t) dt, \quad \Re \lambda > \omega$$

es una pseudoresolvente, es decir, $R(\lambda) - R(\mu) = (\mu - \lambda)R(\lambda)R(\mu)$ con $\Re \lambda, \Re \mu > \omega$, [9], [14]. El operador A definido a través de la anterior pseudoresolvente se llama el *generador infinitesimal* del semigrupo $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$.

Una comprobación inmediata es probar que si $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ es un semigrupo α -veces integrado entonces

$$S_\nu(t) := D^{-(\nu-\alpha)}(S_\alpha)(t) = \frac{1}{\Gamma(\nu-\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\nu-\alpha-1} S_\alpha(s) ds$$

es un semigrupo ν -veces integrado con $\nu \geq \alpha$. Algunas propiedades ya conocidas de un semigrupo α -veces integrado son enunciadas en la siguiente proposición [14].

PROPOSICIÓN 3.1. Sea A el generador de un semigrupo α -veces integrado $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ entonces

- para todo $x \in X$ y $t \geq 0$, $\int_0^t S_\alpha(s)x ds \in D(A)$ y $A \int_0^t S_\alpha(s)x ds = S_\alpha(t)x - \frac{t^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)}x$.
- $S_\alpha(\cdot)x$ es derivable con $t \geq 0$ si y solamente si $S(t)x \in D(A)$ y en este caso

$$\frac{d}{dt} S_\alpha(t)x = A S_\alpha(t)x + \frac{t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)}x.$$

Utilizando los dos apartados de la proposición anterior se puede probar que $u(t) = S_\alpha(t)x$ con $x \in D(A^2)$ satisface la ecuación abstracta, ver por ejemplo [20],

$$tu''(t) - (\alpha - 1 + tA)u'(t) + (\alpha - 1)Au(t) = 0.$$

Si A es un número, la ecuación anterior se reduce a $tu''(t) + (c - tb)u'(t) + au(t) = 0$ ecuación hypergeométrica confluyente cuya solución es expresable mediante las series hypergeométricas confluentes.

De vuelta al Problema Abstracto de Cauchy, Arent [1] probó que si A genera un k -veces semigrupo integrado $\{S(t)_{t \geq 0}\}$ para algún $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, entonces el Problema Abstracto de Cauchy admite solución para todo $x \in D(A^{k+1})$. Para α -veces semigrupos integrados Hieber [9] obtuvo el siguiente resultado.

TEOREMA 3.2. Sea $\alpha \geq 0$, $\varepsilon > 0$ y supongamos que el operador A genera un semigrupo $\{S(t)_{t \geq 0}\}$ α -veces integrado en un espacio de Banach cumpliendo $\|S(t)\| \leq M t^\alpha e^{\omega t}$ para algún $M, \omega \geq 0$ y para todo $t \geq 0$. Entonces existe una única solución clásica del Problema Abstracto de Cauchy para todo $x \in D(A^{\alpha+\varepsilon+1})$.

En [14] se prueba que el operador de Schrödinger, $i\Delta$ genera un semigrupo α -veces integrado con $\alpha \in (1/2, 1]$ en $L^p(\mathbb{R})$ con $1 < p < \infty$.

4. Cálculo Funcional para Semigrupos α -veces Integrados

Anteriormente ya hemos comentado que dada $F \in \mathcal{D}$ y $\mathcal{L}(F)$ su transformada de Laplace, entonces es inmediata la siguiente igualdad

$$\mathcal{L}(F)(z) = \int_0^\infty W^\alpha F(t) D^{-\alpha}(e_z)(t) dt$$

donde $e_z(t) = e^{-zt}$ with $\Re z > 0$. Un semigrupo α -veces integrado es una familia de operadores acotados y fuertemente continuos sobre un espacio de Banach y que tiene un comportamiento similar a $D^{-\alpha}(e_z)(t)$. La igualdad anterior es la llave para definir un cálculo funcional basado en $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ [12], [13]. Denotaremos por $(-A)$ el generador infinitesimal del semigrupo integrado $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ donde el signo menos es introducido al trabajar más adelante con las potencias fraccionarias del generador.

TEOREMA 4.1. Sea $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ un semigrupo α -veces integrado de tipo exponencial ω con $\omega > 0$ de operadores acotados sobre un espacio de Banach X y su generador infinitesimal $((-A), D(-A))$ entonces existe un homomorfismo algebraico continuo $\Theta : AC^{(\alpha)}(e^{\omega t}) \rightarrow B(X)$ such that

$$\Theta(F)x = \int_0^\infty W^\alpha F(t) S_\alpha(t)x dt$$

para todo $x \in X$ y para todo $F \in \mathcal{D}$. Además,

$$- \text{ si } \nu \geq \alpha \text{ then } \int_0^\infty W^\alpha F(t) S_\alpha(t)x dt = \int_0^\infty W^\nu F(t) S_\nu(t)x dt \text{ para todo } F \in \mathcal{D} \text{ y } S_\nu(t)x = D^{-(\nu-\alpha)}(S_\alpha)(t)x.$$

$$- \text{ para todo } F \in \mathcal{D}, \Theta(F)x \in D(A) \text{ con } x \in X \text{ y } A\Theta(F)x = \Theta(F')x + F(0)x.$$

$$- \text{ si } S_\alpha(\cdot)x \text{ derivable para todo } t \geq 0 \text{ (por ejemplo, si } x \in D(A)), \text{ y } F \in \mathcal{D} \text{ entonces}$$

$$\int_0^\infty W^\alpha F(t) \frac{d}{dt} S_\alpha(t)x dt = - \int_0^\infty W^\alpha F'(t) S_\alpha(t)x dt.$$

NOTA 4.2. El cálculo funcional anterior tiene propiedades comunes con la Transformada de Laplace. Si $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ es un C_0 -semigrupo, (esto es un semigrupo 0-veces integrado) el Cálculo Funcional anterior es llamado el cálculo funcional de Hille-Phillips [10].

Dos aplicaciones de este cálculo funcional son comentadas en las siguientes subsecciones.

4.1 Semigrupo de Distribuciones Suaves y Semigrupos α -veces Integrados Temperados

El concepto de Semigrupo de Distribuciones Suaves, *S.D.S.*, fue introducido por Peetre [17]. Balabane y Emamirad [2] definieron su análogo, Grupo de Distribuciones Suaves, y lo aplicaron a la ecuación de Schrödinger en $L^p(\mathbb{R}^n)$ con $1 < p < \infty$. Más tarde, Balabane, Emamirad y Jazar [3] probaron un teorema de equivalencia entre grupos k -veces integrados y grupos de distribuciones suaves of grado k con $k \in \mathbb{N}$. En [13] se extiende este resultado (en el caso de semigrupos) a cualquier orden $\alpha \in \mathbb{R}^+$.

Variantes de estas definiciones, proposiciones y teoremas pueden ser encontradas en las referencias citadas, no obstante, se incluyen aquí para dar una idea completa del contexto de trabajo.

DEFINICIÓN 4.1.1. Sea S el espacio de Schwartz en $[0, \infty)$ considerado ya anteriormente en el párrafo 1, un *Semigrupo de Distribuciones Suaves*, *S.D.S.*, $\mathcal{G} : S \rightarrow B(X)$, es un homomorfismo continuo de S a $B(X)$ que cumple

- $\mathcal{G}(\phi * \varphi) = \mathcal{G}(\phi)\mathcal{G}(\varphi)$.
- existe un subconjunto denso, $D \subset X$, tal que para todo $x \in D$, existe una única aplicación continua $\mathcal{G} \otimes x = f_x(\cdot) : [0, \infty) \rightarrow X$ tal que $f_x(0) = x$ y

$$\mathcal{G}(\phi)x = \int_0^\infty \phi(t)f_x(t)dt$$

con $x \in D$ y $\phi \in \mathcal{D}$.

Un *S.D.S.* puede ser extendido al conjunto de las distribuciones de soporte compacto, \mathcal{E} , de la siguiente forma: sea $\phi \in \mathcal{D}_+$ por $\int_0^\infty \phi(t)dt = 1$. Se define $\phi_s \in \mathcal{D}_+$ con $\phi_s(t) = s^{-1}\phi(s^{-1}t)$ y $s > 0$. Para todo $T \in \mathcal{E}$, $(\mathcal{G}(T), D(\mathcal{G}(T)))$ es un operador acotado definido por

- $D(\mathcal{G}(T)) := \{x \in X \text{ tal que } \mathcal{G}(T * \phi_s)x \text{ converge en } X \text{ cuando } s \rightarrow 0\}$.
- para $x \in D(\mathcal{G}(T))$, $\mathcal{G}(T)x := \lim_{s \rightarrow 0} \mathcal{G}(T * \phi_s)x$.

Es fácil probar que la definición anterior es independiente de la función ϕ , $(\mathcal{G}(T), D(\mathcal{G}(T)))$ es un operador cerrable y densamente definido con $\mathcal{G}(\varphi)x \in D(\mathcal{G}(T))$ para todo $\varphi \in \mathcal{D}_+$ y $x \in X$. La primera consecuencia de esta extensión es poder definir el generador infinitesimal de un *S.D.S.*

DEFINICIÓN 4.1.2. Sea δ_0 la distribución delta de Dirac entonces $\mathcal{G}(-\delta_0^{(1)})$ es el generador infinitesimal de \mathcal{G} .

Si para todo $\phi \in S_+$ y $\mathcal{G} : S \rightarrow B(X)$ un S.D.S. cumple

$$\|\mathcal{G}(\phi)\| \leq \int_0^\infty t^\alpha |W^\alpha(\phi)(t)| dt = \|\phi\|_\alpha$$

con $\alpha \in \mathbb{R}^+$ entonces se dice que \mathcal{G} es un S.D.S. de grado α . La complección de S en esta norma se denota por $AC^{(\alpha)}(t^\alpha)$. Además $AC^{(\alpha)}(t^\alpha) \hookrightarrow AC^{(\beta)}(t^\beta)$ para $0 \leq \beta \leq \alpha$.

TEOREMA 4.1.3. Sea $((-A), D(-A))$ un operador densamente definido y cerrado y $\alpha > 0$. Entonces lo siguiente es equivalente

- $((-A), D(-A))$ es el generador infinitesimal de un semigrupo α -veces integrado, $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$, tal que $\|S_\alpha(t)\| \leq Ct^\alpha$ with $t \geq 0$ (semigrupo temperado).
- $((-A), D(-A))$ es el generador infinitesimal de un S.D.S. de grado α .

Si $\|S_\alpha(t)\| \leq Ct^\alpha$ para todo $t \geq 0$ entonces $\sigma(-A) \subset (-\infty, 0]$. Para $\nu, \varepsilon > 0$, consideramos la función

$$f_{\varepsilon, \nu}(t) := \frac{t^{\nu-1} e^{-\varepsilon t}}{\Gamma(\nu)} \chi_{(0, \infty)}(t).$$

Entonces $f_{\varepsilon, \nu} \in AC^{(n)}(t^n)$ para todo $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ y por tanto $f_{\varepsilon, \nu} \in AC^{(\alpha)}(t^\alpha)$ para todo $\alpha \geq 0$ y $\mathcal{G}(f_{\varepsilon, \nu}) = (\varepsilon + A)^{-\nu} \in B(X)$.

4.2 Potencias Fraccionarias del Generador Infinitesimal

En esta última subsección seguiremos considerando $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ un semigrupo α -veces integrado y temperado. Denotaremos Θ el homomorfismo considerado en la sección anterior y asociado a $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ entonces

- $\Theta(\phi) \in B(X)$ para todo $\phi \in S$ y
- $\Theta(T)$ es un operador cerrado y densamente definido con $T \in \mathcal{E}$.

Ahora estamos interesado en definir $\Theta(T)$ con T perteneciendo a un conjunto de distribuciones más amplio que el conjunto de las distribuciones de soporte compacto pero usando el mismo método. Queremos que este conjunto incluya a la distribución temperada $\delta_0^{(\nu)}$ con $\nu \in \mathbb{R}$ ya que su transformada de Laplace es z^ν y formalmente [12]

$$\mathcal{L}(\delta_0^{(\nu)}) \equiv \Theta(\delta_0^{(\nu)}) \equiv A^\nu.$$

Notar que en general si se convoluciona un distribución temperada con una función de soporte compacto no se obtiene una función de la clase de Schwartz. Por ello se hace necesaria la siguiente definición.

DEFINICIÓN 4.2.1. Sea $T \in \mathcal{S}'_+$, se dice T es $AC^{(\alpha)}(t^\alpha)$ -sumable si $T * \phi \in AC^{(\alpha)}(t^\alpha)$ para todo $\phi \in \mathcal{D}$; en el caso $\alpha = 0$, se llama \mathbb{R}^+ -sumable [12].

DEFINICIÓN 4.2.2. Se denota por $\delta_0^{(\nu)}$ la distribución temperada cuya transformada de Laplace es z^ν con $\nu \in \mathbb{R}$.

La siguiente proposición enuncia algunas propiedades de esta distribución [7].

PROPOSICIÓN 4.2.3. Sea $\delta_0^{(\nu)}$ con $\nu \in \mathbb{R}$ la distribución temperada definida anteriormente entonces

$$(i) - \delta_0^{(\nu)} \equiv \frac{t^{|\nu|-1}}{\Gamma(|\nu|)} \chi_{[0,\infty)}(t) \text{ para } \nu < 0.$$

$$- \delta_0^{(\nu)} \equiv -\Gamma(\nu+1) \frac{\sin(\pi\nu)}{\pi} P.F. \frac{\chi_{[0,\infty)}(t)}{t^{\nu+1}} \text{ para } \nu \in \mathbb{R}^+ \setminus \mathbb{N}.$$

$$- \delta_0^{(n)} \text{ para } n \in \mathbb{N} \cup \{0\}.$$

$$(ii) d^k \delta_0^{(\nu)} = \delta_0^{(\nu-k)} \text{ con } k \in \mathbb{N}, \text{ donde "d" es la derivación en el sentido de distribuciones.}$$

$$(iii) \delta_0^{(\nu)} * \delta_0^{(\mu)} = \delta_0^{(\nu+\mu)} \text{ con } \nu, \mu \in \mathbb{R}.$$

En [13] es probado que $\delta_0^{(\nu)}$ con $\nu > 0$ es $AC^{(\alpha)}(t^\alpha)$ -sumable con $\alpha \geq 0$. Para toda distribución T que sea $AC^{(\alpha)}(t^\alpha)$ -sumable se puede decir $\Theta(T)$ utilizando la construcción que se realizaba en la subsección anterior para las distribuciones de soporte compacto.

En este punto se nos ofrece dos posibilidades para definir A^ν con $\nu \in \mathbb{R}$. La primera es utilizar $\Theta(\delta_0^{(\nu)})$ para $\nu > 0$ y la segunda, más clásica, utilizar $(\varepsilon + A)^{-\nu}$ también $\nu > 0$. Sigamos este segundo camino y probemos después la equivalencia con el primer planteamiento.

Recordar, $f_{\varepsilon,\nu} \in AC^{(\alpha)}(t^\alpha)$ con

$$f_{\varepsilon,\nu}(t) = \frac{t^{\nu-1} e^{-\varepsilon t}}{\Gamma(\nu)} \chi_{(0,\infty)}(t)$$

con $\nu, \varepsilon > 0, \alpha \geq 0$ y $\mathcal{G}(f_{\varepsilon,\nu}) = \Theta(f_{\varepsilon,\nu}) = (\varepsilon + A)^{-\nu} \in \mathcal{B}(X)$. Es fácil probar $\text{Ker}(\varepsilon + A)^{-\nu} = \{0\}$ para todo $\varepsilon, \nu > 0$.

DEFINICIÓN 4.2.4. Sea $((-A), D(-A))$ el generador infinitesimal de un semigrupo α -veces integrado, $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ temperado se define

$$- (\varepsilon + A)^\nu \text{ por } (\varepsilon + A)^\nu := ((\varepsilon + A)^{-\nu})^{-1}.$$

$$- (A^\nu, D(A^\nu)) \text{ con } \nu > 0 \text{ por}$$

$$D(A^\nu) := \{x \in \bigcap_{\varepsilon > 0} D((\varepsilon + A)^\nu) \mid \text{t.q. existe } \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\varepsilon + A)^\nu x\},$$

$$A^\nu x := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\varepsilon + A)^\nu x,$$

con $x \in D(A^\nu)$, además $D((\varepsilon + A)^\nu) = D(A^\nu)$ con $\nu, \varepsilon > 0$.

– $(A^{-\nu}, D(A^{-\nu}))$ with $\nu > 0$ by

$$D(A^{-\nu}) : = \{x \in X \mid \text{t. q. existe } \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\varepsilon + A)^{-\nu} x\},$$

$$A^{-\nu} x : = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\varepsilon + A)^{-\nu} x,$$

con $x \in D(A^{-\nu})$.

TEOREMA 4.2.5. Sea $\{S_\alpha(t)\}_{t \geq 0}$ un semigrupo α -veces integrado tal que $\|S_\alpha(t)\| \leq Ct^\alpha$ con $t \geq 0$ y $\alpha > 0$, $((-A), D(-A))$ su generador infinitesimal y $\delta_0^{(\nu)}$ la distribución temperada definida anteriormente, entonces

– $\Theta(e^{-\varepsilon t} \delta_0^{(\nu)}) = (\varepsilon + A)^\nu$ con $\varepsilon, \nu > 0$.

– $\Theta(\delta_0^{(\nu)}) = A^\nu$ con $\nu > 0$.

– Si A es inyectivo entonces $A^{-\nu} = (A^\nu)^{-1}$ con $\nu > 0$.

Debido a la parte tercera de este último teorema y recordando que $\delta_0^{(\nu)} * \frac{\nu-1}{\Gamma(\nu)} = \delta_0$ con $\nu > 0$ entonces puede ser definido $\mathcal{G}(\frac{\nu-1}{\Gamma(\nu)}) =: A^{-\nu}$. Algunas propiedades de A^ν son ahora consecuencias inmediatas de propiedades de $\delta_0^{(\nu)}$, como por ejemplo, $A^\nu A^\mu = A^{\nu+\mu}$ con $\nu, \mu \in \mathbf{R}$.

Si $0 \in \rho(A)$, esta definición de potencias fraccionarias de un operador cerrado coincide con la definición de Balakrishnan [4]:

$$A^{-\nu} = \frac{\sin \nu \pi}{\pi} \int_0^\infty \lambda^{-\nu} (\lambda + A)^{-1} d\lambda.$$

con $0 < \nu < 1$. Para ver más detalles, [13].

Agradecimientos

Este trabajo ha sido subvencionado por el Proyecto PB97-0094 y por una beca FPI-DGESIC.

Referencias

- [1] Arendt, W.: *Vector-Valued Laplace Transforms and Cauchy Problems*. Israel J. Math. **59**(3) (1987), 327–352
- [2] Balabane, M., and H. A. Emamirad: *Smooth Distribution Group and Schrödinger Equation in $L^p(\mathbf{R}^n)$* . J. Math. Anal. and Appl. **70** (1979), 61–71
- [3] Balabane, M., H. Emamirad and M. Jazar: *Spectral Distributions and Generalization of Stone's Theorem*. Acta. Appl. Math. **31** (1993), 275–295

- [4] Balakrishnan, A. V.: *Fractional Powers of Closed Operators and the Semigroups Generated by them*. Pacific. J. Math. **10** (1960), 419-437
- [5] Butzer, P. L., and H. Berens: *Semi-Groups of Operators and Approximation*. Springer-Verlag, New York-Berlin-Heidelberg 1967
- [6] DeLaubenfels, R., and M. Jazar: *Functional Calculi, Regularized Semigroups and Integrated Semigroups*. Studia Math. **132**(2) (1999), 151-172
- [7] Doetsch, G.: *Introduction to the Theory and Applications of the Laplace Transformation*. Springer-Verlag, New York-Berlin-Heidelberg 1974
- [8] Galé, J. G., and T. Pytlik: *Functional Calculus for Infinitesimal Generators of Holomorphic Semigroups*. J. Funct. Anal. **150**(2) (1997), 307-355
- [9] Hieber, M.: *Laplace Transforms and α -Times Integrated Semigroups*. Forum Math **3** (1991), 595-612
- [10] Hille, E., and R. S. Phillips: *Functional Analysis and Semigroups*. Amer. Math. Soc. Coll. XXXI 1957
- [11] Hörmander, L.: *Estimates for translation invariant operators in L^p spaces*. Acta Math. **104** (1960), 93-140
- [12] Lanford III, O. E., and D. W. Robinson: *Fractional Powers of Generators of Equicontinuous Semigroups and Fractional Derivates*. J. Austral. Math. Soc. (Series A) **46** (1989), 473-504
- [13] Miana, P.J.: *α -Times Integrated Semigroups and Fractional Derivation*. Preprint.
- [14] Mijatović, M., and S. Pilipović: *α -Times Integrated Semigroups ($\alpha \in \mathbb{R}^+$)*. J. Math. Anal. and Appl. **210** (1997), 790-803
- [15] Miller, K.S., and B. Ross: *An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations*. Wiley, New York 1993
- [16] Pazy, A.: *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, New York-Berlin-Heidelberg 1983
- [17] Peetre, J.: *Sur la théorie des semi-groupes distributions*. Collège de France, Séminaire E.D.P.II, Nov.1963-Mai 1964, pp 76-94
- [18] Ross, B.: *A Brief History and Exposition of the Fundamental Theory of Fractional Calculus* in "Fractional Calculus and its Applications" pp. 1-36. Lect. Notes in Math. **457**. Springer-Verlag, Berlin 1975
- [19] Rudin, W.: *Functional Analysis*. McGraw-Hill, New-York 1973
- [20] Yang, G.: *The Semigroup Theory and Abstract Linear Equations* in "Recent advances in differential equations" pp. 101-109. Pitman Res. Notes in Math. Series **386**. Addison Wesley Longman, Harlow 1998

Spectral Theory for Representations

Pedro J. Miana

Departamento de Matemáticas. Universidad de Zaragoza

pjmiana@posta.unizar.es

November 29, 1999

Abstract

In this paper we are concerned with certain concepts related with representations $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$, i.e., algebra homomorphisms from a regular semisimple Banach algebra to continuous linear operators over a Banach space X . A particular case of these representations is considered by Colojoara and Foias in [5] where \mathcal{A} is an admissible algebra of functions over an open set $\Omega \subset \mathbb{C}$ and the mapping ϕ is called as an \mathcal{A} -spectral function. Another example was treated by Maeda in [18] where \mathcal{A} is a basic algebra and ϕ is a continuous homomorphism called \mathcal{A} -spectral representation.

1. Introduction

In this paper we are concerned with certain concepts related with representations $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$, i.e., algebra homomorphisms from a regular semisimple Banach algebra to continuous linear operators over a Banach space X . A particular case of these representations is considered by Colojoara and Foias in [5] where \mathcal{A} is an admissible algebra (see Definition 3.1.2.) of functions over an open set $\Omega \subset \mathbb{C}$ and the mapping ϕ is called as an \mathcal{A} -spectral function. Another example was treated by Maeda in [18] where \mathcal{A} is a basic algebra, Definition 1.1, and ϕ is a continuous homomorphism called \mathcal{A} -spectral representation.

In general terms, almost every functional calculi can be consider as examples of this situation. Functional calculi for hermitian elements [K] and for elements with growth of degree α [4] are direct applications. But the more important example is the Banach algebra $L^1(G)$ [3], where G is a locally compact abelian group (see last section). If U is a suitably continuous representation of G by means of isometries on a Banach space X , it can be defined $U(\mu) \in \mathcal{L}(X)$ with $\mu \in M(G)$. In this case, Arvenson [3] defined the concepts of spectrum of U , local spectra and maximal spectral subspaces. For certain $\mu \in M(G)$ [6] showed that $\sigma(U(\mu)) = \overline{\hat{\mu}(\text{sp}(U))}$. This fact is similar to a well-known result of basic theory of Banach algebras [L] for any Banach algebra \mathcal{A} without identity: $\sigma(a) = \hat{a}(\text{Sp}(\mathcal{A})) \cup \{0\} = \overline{\hat{a}(\text{Sp}(\mathcal{A}))}$ with $a \in \mathcal{A}$. Now in the general context,

an interesting open question is the following: which conditions a multiplier $T \in M(\mathcal{A})$ satisfies $\hat{T}(\text{Sp}(\mathcal{A})) = \sigma_{M(\mathcal{A})}(T)$, i. e., T has natural spectrum under [6], [8] ?.

Properties of $\phi(a)$ are related with the "good quality" of \hat{a} over $\text{Sp}(\mathcal{A})$. This quality may depend on \mathcal{A} . If \mathcal{A} is regular and semisimple then $\phi(a)$ is always a decomposable operator over X in the sense of Foias [LN]. If ϕ admits an extension $\Phi : M(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{L}(X)$, it is natural to ask ourselves about the properties that $\Phi(T)$ satisfies as operator on X , for example if it is decomposable or if it depends on T as operator over \mathcal{A} [12]. This knowledge about the properties of $\Phi(T)$ can be applied to harmonic analysis [19], automatic continuity theory [LN], or spectral independence [1].

In the first section, some basic definitions and propositions about representations for Banach algebras are introduced and it is proved an Abstract Wiener Tauberian Theorem. In the second section, the local spectrum of the representation is treated. Some of these results were proved by Neumann [19] under other conditions.

Another concept used in spectral theory [2], *spectral capacity*, is defined in a general framework and its relationship with spectrum and local spectrum of the representation are studied in the third section. The representations are extended to the algebra of multipliers of \mathcal{A} and $\Phi(T)$ is a closed operator in the forth section.

2. Spectrum of Representations

Let $\gamma : \mathcal{A} \rightarrow \hat{\mathcal{A}} \subset C_0(\text{Sp}(\mathcal{A}))$ be the Gelfand transformation. It is known (see [13]) that

- if \mathcal{A} has an identity, then $\text{Sp}(\mathcal{A})$ is a compact Hausdorff topological space with the Gelfand topology.
- if \mathcal{A} is without identity, then $\text{Sp}(\mathcal{A})$ is a locally compact Hausdorff topological space with the Gelfand topology and $\text{Sp}(\mathcal{A} \oplus \mathbb{C}e) = \text{Sp}(\mathcal{A}) \cup \{\tau_\infty\}$ where $\mathcal{A} \oplus \mathbb{C}e$ is the unitization of \mathcal{A} .

If $E \subset \text{Sp}(\mathcal{A})$ then the kernel of E , $k(E)$, is defined as $k(E) = \bigcap_{\tau \in E} \ker(\tau)$ if $E \neq \emptyset$ and $k(\emptyset) = \mathcal{A}$. If $I \subset \mathcal{A}$ is an ideal the hull of I , $h(I)$, is defined as $h(I) = \{\tau \in \text{Sp}(\mathcal{A}) \mid I \subset \ker(\tau)\}$. Given $E \subset \text{Sp}(\mathcal{A})$, it is defined the Kuratowski closure by the operation $\text{cl}(E) = h(k(E))$. This family $\{\text{cl}(E) \mid E \subset \text{Sp}(\mathcal{A})\}$ defines a topology in $\text{Sp}(\mathcal{A})$ as closed sets of this topology. It is known as the *hull-kernel* topology and in general is cloaser than the Gelfand topology; but in our case, as \mathcal{A} is regular, both topologies coincide.

PROPOSITION 2.1 ([13]). *Let \mathcal{A} be a semisimple regular commutative Banach algebra and $I \subset \mathcal{A}$ a closed ideal, then*

$$j(h(I)) \subset I \subset k(h(I))$$

where $j(h(I)) = \{a \in \mathcal{A} \mid \hat{a} \in C_c(\text{Sp}(\mathcal{A})), \hat{a} \equiv 0 \text{ in a neighbourhood of } h(I)\}$.

DEFINITION 2.2. Let X be a Banach space and \mathcal{A} a semisimple regular commutative Banach algebra. A representation of \mathcal{A} on X is an algebra homomorphism ϕ from \mathcal{A} into $\mathcal{L}(X)$. Note ϕ is not necessarily continuous.

A representation is called *non degenerate* if $\{x \in X \mid \phi(a)x = 0 \text{ for all } a \in \mathcal{A}\} = \{0\}$ and *strongly non degenerate* if $\{x \in X \mid \phi(a)x = 0 \text{ for all } a \in \mathcal{A} \text{ with } \hat{a} \in C_c(\text{Sp}(\mathcal{A}))\} = \{0\}$. If \mathcal{A} is a Tauberian algebra, i.e., $\{a \mid a \in \mathcal{A}, \hat{a} \in C_c(\text{Sp}(\mathcal{A}))\}$ is norm dense in \mathcal{A} , and ϕ is continuous, both concepts are equivalent.

It is defined the *spectrum* of the representation as the hull of the kernel of ϕ , which is the closed ideal: $\text{Sp}(\phi) := h(\ker(\phi)) = \{\tau \in \text{Sp}(\mathcal{A}) \mid \hat{a}(\tau) = 0 \text{ for any } a \in \ker(\phi)\}$.

By the Proposition 2.1 it follows immediately the following corollary.

COROLLARY 2.3. Let X be a Banach space, \mathcal{A} a semisimple regular commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation. If $\hat{a} \equiv 0$ in a neighbourhood of $\text{Sp}(\phi)$ and \hat{a} is compactly supported then $a \in \ker(\phi)$.

If $\text{Sp}(\mathcal{A})$ is noncompact and \mathcal{A} satisfies the Ditkin's condition at infinity, i.e., for any $a \in \mathcal{A}$ there exists a sequence $(a_n) \subset \mathcal{A}$ such that $aa_n \rightarrow a$ and $\hat{a}_n \in C_c(\text{Sp}(\mathcal{A}))$ with $n = 1, 2, 3, \dots$, the last corollary can be improved:

COROLLARY 2.4. Let X be a Banach space, \mathcal{A} a semisimple regular commutative Banach algebra which satisfies the Ditkin's condition at infinity, and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a continuous representation of \mathcal{A} on X . If $\text{supp}(\hat{a}) \cap \text{Sp}(\phi) = \emptyset$, then $a \in \ker(\phi)$.

If ϕ is a strongly non degenerate representation, it can be shown the following Corollary.

COROLLARY 2.5. Let X be a Banach space, \mathcal{A} a semisimple regular commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly non degenerate representation of \mathcal{A} on X . If $\text{supp}(\hat{a}) \cap \text{Sp}(\phi) = \emptyset$, then $a \in \ker(\phi)$.

Proof: Take $a \in \mathcal{A}$ such that $\text{supp}(\hat{a}) \cap \text{Sp}(\phi) = \emptyset$, then for $b \in \mathcal{A}$ with \hat{b} compactly supported, $\text{supp}(\widehat{ab}) \cap \text{Sp}(\phi) = \emptyset$ holds. \widehat{ab} is compactly supported and by the Corollary 2.3, it gets $\phi(ab)x = \phi(b)\phi(a)x = 0$ for all $x \in X$. Then $\phi(a)x = 0$ for all $x \in X$ and $a \in \ker(\phi)$. ■

If $\text{Sp}(\phi)$ is a set of spectral synthesis, i.e, $\ker(\phi) = k(h(\ker(\phi)))$, then if $\hat{a} \equiv 0$ in $\text{Sp}(\phi)$ then $a \in \ker(\phi)$.

COROLLARY 2.6. Let X be a Banach space, \mathcal{A} a Tauberian semisimple regular commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation of \mathcal{A} on X such that $\phi(\mathcal{A})X$ is norm dense

in X . Then, $Sp(\phi) = \emptyset$ if and only if $X = \{0\}$.

Proof: \mathcal{A} is Tauberian if and only if \emptyset is a set of spectral synthesis, i.e., $k(\emptyset) = \mathcal{A}$. Then $\ker(\phi) = k(Sp\phi) = k(\emptyset) = \mathcal{A}$; as $\phi(\mathcal{A})X$ is dense in X , then $X = \{0\}$. The converse implication is immediate. ■

COROLLARY 2.7. *Let X be a Banach space, \mathcal{A} a semisimple regular commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation of \mathcal{A} on X . Then,*

- (i) *if \mathcal{A} is a Tauberian algebra and ϕ is non degenerate, $Sp(\phi) = \emptyset$ if and only if $X = \{0\}$.*
- (ii) *if ϕ is strongly non degenerate, $Sp(\phi) = \emptyset$ if and only if $X = \{0\}$.*

Proof: (i) is proved just as Corollary 2.6. (ii) is immediate by Corollary 2.5. ■

Let Y be a closed subspace of X , and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation of \mathcal{A} on X . It is said that Y is *invariant* for ϕ if $\phi(a)Y \subset Y$ for any $a \in \mathcal{A}$. For any Y invariant subspace two associated representations can be defined: $\phi_Y : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(Y)$ a restrictive representation; and $\phi/Y : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X/Y)$ a quotient representation of ϕ . It is easy to show that $Sp(\phi_Y) \cup Sp(\phi/Y) = Sp(\phi)$. Using these representations, it can be proved the following Abstract Wiener Tauberian Theorem.

THEOREM 2.8. *Let X be a Banach space, \mathcal{A} a semisimple regular commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation of \mathcal{A} on X . Take $a \in \mathcal{A}$ such that \hat{a} has no zeros on $Sp(\phi)$.*

- (i) *If \mathcal{A} is a Tauberian algebra and ϕ is non degenerate; or if ϕ is strongly non degenerate, then $\phi(a)$ has trivial kernel.*
- (ii) *If \mathcal{A} is a Tauberian algebra and $\phi(\mathcal{A})X$ is dense in X , then $\phi(a)X$ is dense in X .*

Proof: First take $Y = \ker(\phi(a))$ and consider ϕ_Y the non-degenerate subrepresentation of \mathcal{A} on Y . It is clear that $\phi_Y(a) = 0$ and that \hat{a} has no zeros on $Sp(\phi_Y)$. Then by the Corollary 2.7 $Y = \{0\}$.

Now take $Y = \overline{\phi(a)X}$ and consider ϕ/Y the quotient representation. $(\phi/Y)(a) = 0$ and \hat{a} has no zeros on $Sp(\phi/Y)$, so $Sp(\phi/Y) = \emptyset$. $(\phi/Y)(\mathcal{A})X/Y$ is dense in X/Y and by Corollary 2.6, $X/Y = \{0\}$ and $X = \overline{\phi(a)X}$. ■

REMARK. One of the versions of classical Wiener Tauberian Theorem can be found in [17 p.148]: let G be a locally compact Abelian group. If $f \in L^1(G)$ is such that \hat{f} never vanishes, then the translates of f generate $L^1(G)$.

3. Local Spectrum of Representations

Let X be a Banach space, \mathcal{A} a semisimple regular commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation of \mathcal{A} on X . Given $x \in X$ it is defined the closed ideal I_x as

$$I_x := \{a \in \mathcal{A} \mid \phi(a)x = 0\}.$$

ϕ is non-degenerate and I_x is a proper ideal for all $x \neq 0$ are equivalent.

DEFINITION 3.1. Given $x \in X$ and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation, the hull of the ideal I_x is called the *local spectrum* of x with regard to ϕ , i.e.,

$$\text{sp}_\phi(x) := h(I_x) = \{\tau \in \text{Sp}(\mathcal{A}) \mid \hat{a}(\tau) = 0 \text{ for all } a \in I_x\}.$$

Some properties of $\text{sp}_\phi(x)$ are joined in the following proposition.

PROPOSITION 3.2. Let X be a Banach space, $x, y \in X$, \mathcal{A} a semisimple regular commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation of \mathcal{A} on X . Then

- (i) $\text{sp}_\phi(x)$ is a closed set in $\text{Sp}(\mathcal{A})$ and $\text{sp}_\phi(x) \subset \text{Sp}(\phi)$.
- (ii) If $x = 0$ then $\text{sp}_\phi(x) = \emptyset$.
- (iii) $\text{sp}_\phi(x) = \text{sp}_\phi(\lambda x)$ with $\lambda \in \mathbb{C} \setminus 0$.
- (iv) $\text{sp}_\phi(x + y) = \text{sp}_\phi(x) \cup \text{sp}_\phi(y)$.
- (v) $\text{sp}_\phi(\phi(a)x) \subset \text{sp}_\phi(x) \cap \text{supp}(\hat{a})$ with $a \in \mathcal{A}$.

Proof: (i), (ii) and (iii) are immediate by the definition of $\text{sp}_\phi(x)$. For (iv), let $\tau \notin \text{sp}_\phi(x) \cup \text{sp}_\phi(y)$, then there exist $a, b \in \mathcal{A}$ such that $\phi(a)x = \phi(b)y = 0$ and $\hat{a}(\tau) \neq 0 \neq \hat{b}(\tau)$. If we consider ab then

$$\phi(ab)(x + y) = \phi(a)\phi(b)(x + y) = \phi(a)(\phi(b)x) = \phi(b)(\phi(a)x) = 0$$

and $\widehat{ab}(\tau) = \hat{a}(\tau)\hat{b}(\tau) \neq 0$, then $\tau \notin \text{sp}_\phi(x + y)$. For (v) it is easy to prove that $\text{sp}_\phi(\phi(a)x) \subset \text{sp}_\phi(x)$. Take $\tau \notin \text{supp}(\hat{a})$, then there exists an open set U with $\tau \in U$ and $U \subset \text{Sp}(\mathcal{A})$ such that $U \cap \text{supp}(\hat{a}) = \emptyset$. As $\text{Sp}(\mathcal{A})$ is a locally compact space there exists a compact set K such that $\tau \in K$, $K \subset U$. As \mathcal{A} is a regular Banach algebra, it is normal and there exists $b \in \mathcal{A}$ such that $\hat{b}(\varphi) = 1$ if $\varphi \in K$ and $\hat{b}(\varphi) = 0$ if $\varphi \in \text{supp}(\hat{b})$. So $\widehat{ab} = 0$ and as \mathcal{A} is semisimple, $ab = 0$. Then $\phi(b)\phi(a)x = 0$ and $\tau \notin \text{sp}_\phi(\phi(a)x)$ because $\hat{b}(\tau) = 1$. ■

DEFINITION 3.3. Let X be a Banach space, $x \in X$, \mathcal{A} a semisimple regular commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a non degenerate representation of \mathcal{A} on X . Then we define the closed subspace $Y(x)$ by

$$Y(x) := \overline{\{\phi(a)x \mid a \in \mathcal{A}\}}.$$

$Y(x)$ is an invariant subspace by ϕ and $Y(x) = \{0\}$ if and only if $x = 0$.

PROPOSITION 3.4. In the same conditions of Definition 3.3, it holds $sp(\phi_{Y(x)}) \subset sp_\phi(x)$.

Proof: Take $\tau \in sp(\phi_{Y(x)})$ and $a \in \mathcal{A}$ such that $\phi(a)x = 0$. We prove first that $\phi(a)_{Y(x)} \equiv 0$: let $y \in Y(x)$, then there exists $(a_n) \subset \mathcal{A}$ such that $\phi(a_n)x \rightarrow y$; now $\phi(a)y = \lim_{n \rightarrow \infty} \phi(a)\phi(a_n)x = 0$, and so $\phi(a)_{Y(x)} \equiv 0$ and $\hat{a}(\tau) = 0$. ■

THEOREM 3.5. Let X be a Banach space, $x \in X$, \mathcal{A} a semisimple, regular, commutative Banach algebra, $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly non degenerate representation of \mathcal{A} on X and $a \in \mathcal{A}$ such that $supp(\hat{a}) \cap sp_\phi(x) = \emptyset$. Then $\phi(a)x = 0$.

Proof: Take $Y = Y(x)$ as in the Definition 3.3 By Proposition 3.4 $\hat{a} \equiv 0$ in a neighbourhood of $sp(\phi_Y)$. By Corollary 2.5 it is got that $\phi(a)_Y = 0$. In particular $\phi(a)\phi(b)x = \phi(b)(\phi(a)x) = 0$ for all $b \in \mathcal{A}$ and $x \in X$. As ϕ is strongly non-degenerate, $\phi(a)x = 0$. ■

COROLLARY 3.6. In the same conditions of Theorem 3.5 consider $x \in X$ and $a, b \in \mathcal{A}$ such that $\hat{a} \equiv \hat{b}$ in a neighbourhood of $sp_\phi(x)$. Then $\phi(a)x = \phi(b)x$.

PROPOSITION 3.7. Let X be a Banach space, $x \in X$, \mathcal{A} semisimple regular commutative Banach algebra, $K \subset Sp(\mathcal{A})$ a compact set, $a \in \mathcal{A}$ such that $\hat{a} \equiv 1$ in a neighbourhood of K and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly non degenerate representation of \mathcal{A} on X . Then $\phi(a)x = x$ for all $x \in X$ such that $sp_\phi(x) \subset K$.

Proof: Take $Y(x)$ the subspace defined above. For any $b \in \mathcal{A}$ it holds that ab and b are equal in a neighbourhood of $sp_\phi(x)$ and by Corollary 3.6 $\phi(ab)x = \phi(b)x$. Then $\phi(b)(\phi(a)x - x) = 0$. Using ϕ is strongly non-degenerate it is got that $\phi(a)x = x$. ■

COROLLARY 3.8. Let X be a Banach space, $x \in X$, \mathcal{A} semisimple regular commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation of \mathcal{A} on X .

- (i) If \mathcal{A} is a Tauberian algebra and ϕ is a non degenerate representation, then $sp_\phi(x) = 0$ if and only if $x = 0$.
- (ii) If ϕ is a strongly non degenerate representation, then $sp_\phi(x) = 0$ if and only if $x = 0$.

Proof: (i) \emptyset is a set of spectral synthesis. Then $\emptyset = sp_\phi(x) = h(I_x) = h(\mathcal{A})$ and $\mathcal{A} = I_x$. As ϕ is non degenerate, $x = 0$. (ii) can be found in [19]. ■

THEOREM 3.9. Let X be a Banach space, \mathcal{A} a semisimple, regular, commutative Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a non degenerate representation of \mathcal{A} on X . Then

$$Sp(\phi) = \overline{\bigcup_{x \in X} sp_\phi(x)}.$$

Proof: It is clear that $\overline{\bigcup_{x \in X} \text{sp}_\phi(x)} \subset \text{sp}(\phi)$. For the other embbeding, take $\tau \notin \overline{\bigcup_{x \in X} \text{sp}_\phi(x)}$, then there exist U, V open sets such that $\tau \in U$, $\overline{\bigcup_{x \in X} \text{sp}_\phi(x)} \subset V$ and $U \cap V = \emptyset$. Now it can be taken $K \subset U$ with $\tau \in K$. Now, in addition now there exists an open set W such that $\tau \in W \subset \overline{W} \subset K$. As $\text{Sp}(\mathcal{A})$ is locally compact, it can be found a compact set \tilde{K} such that $\tau \in \tilde{K} \subset W$. Using that \mathcal{A} is a normal Banach algebra and $\tilde{K} \cap W^c = \emptyset$, we have that there exists $a \in \mathcal{A}$ with $\hat{a}(\varphi) = 1$ for all $\varphi \in \tilde{K}$ and $\hat{a}(\varphi) = 0$ for all $\varphi \in W^c$. Then $\text{supp}(\hat{a}) \subset \overline{W}$ and \hat{a} is compactly supported. By the Theorem 3.5, $\phi(a)x = 0$ for all $x \in X$, then $\phi(a) = 0$ and $\hat{a}(\tau) = 1$. It is shown $\tau \notin \text{Sp}(\phi)$. ■

REMARK. In [19], it is proved the Theorem 3.9 under the condition of ϕ being a strongly non degenerate representation.

4. Maximal Spectral Subspaces for Representations

All along this paragraph, we will consider $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly non degenerate representation, where again \mathcal{A} is a regular semisimple Banach algebra.

DEFINITION 4.1. Let Y be a closed subspace of X , Y is said to be a *maximal spectral subspace* of ϕ if

- (i) Y is invariant by ϕ , i.e., $\phi(a)y \in Y$ for all $a \in \mathcal{A}$ and $y \in Y$,
- (ii) for any closed subspace Z invariant by ϕ , such that $\text{sp}(\phi_Z) \subset \text{sp}(\phi_Y)$ it happens that $Z \subset Y$.

Given $F \subset \text{Sp}(\mathcal{A})$ a closed subset in the hull-kernel topology, it is defined

$$X_\phi(F) := \{x \in X \mid \text{sp}_\phi(x) \subset F\}.$$

We are interested on proving that $X_\phi(F)$ is a maximal spectral subspace of ϕ . For this, we have to show the following lemma.

LEMMA 4.2. Let F be a closed set in the hull-kernel topology of $\text{Sp}(\mathcal{A})$, $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly non degenerate representation and $J_c(F) := \{a \in \mathcal{A} \mid \text{supp}(\hat{a}) \equiv 0 \text{ in a neighbourhood of } F\}$.

Then $X_\phi(F) = \bigcap_{a \in J_c(F)} \ker(\phi(a))$.

Proof: It is clear, by Theorem 3.5 that if $x \in X_\phi(F)$ then $\phi(a)x = 0$ for all $a \in J_c(F)$.

Take $x \in \bigcap_{a \in J_c(F)} \ker(\phi(a))$ and suppose $\text{sp}_\phi(x) \not\subset F$. Then there exists $\tau \in \text{sp}_\phi(x)$ with $\tau \notin F$. Take U, V open sets in hull-kernel topology such that $U \cap V = \emptyset$, $\tau \in U$ and $F \subset V$. A compact neighbourhood of τ , K , and an open set W such that $\tau \in W \subset \overline{W} \subset K \subset U$ can be found. Now let L be a compact neighbourhood of τ such that $L \subset W$ and $E = \text{Sp}(\mathcal{A}) \setminus W$. As E

is a closed set and L a compact set such that $L \cap E = \emptyset$, there exists $a \in \mathcal{A}$ such that $\hat{a}(\tau) = 1$ for all $\tau \in L$ and $\hat{a}(\tau) = 0$ for all $\tau \in E$. Besides, $\text{supp}(\hat{a}) \subset \overline{E^c} = \overline{W}$ and $F \subset V \subset E$. Then $a \in J_c(F)$ and $\phi(a)x = 0$. As $\tau \in \text{sp}_\phi(x)$, $\hat{a}(\tau) = 0$, but this is not possible. ■

THEOREM 4.3. *Given a closed set $F \subset \text{Sp}(\mathcal{A})$, $X_\phi(F)$ is a maximal spectral subspace of ϕ . Moreover if M is a maximal spectral subspace of ϕ , then $M = X_\phi(\text{Sp}(\phi_M))$.*

Proof: Let us denote $Y = X_\phi(F)$. By the Lemma 4.2, Y is a closed subspace of X and invariant by ϕ (Proposition 3.2 (v)). Besides, as $\text{sp}_{\phi_Y}(x) = \text{sp}_\phi(x)$ for all $x \in Y$, it is clear by the Theorem 3.9, $\text{Sp}(\phi_Y) \subset F$.

Let Z be a closed subspace invariant by ϕ and $\text{Sp}(\phi_Z) \subset \text{Sp}(\phi_Y)$. Given $x \in Z$ then, again by Theorem 3.9 applied to Z , $\text{sp}_\phi(x) = \text{sp}_{\phi_Z}(x) \subset \text{Sp}(\phi_Z) \subset \text{Sp}(\phi_Y) \subset F$ and this proves that $Z \subset Y$ and so Y is a maximal spectral subspace of ϕ .

Now let M be a maximal spectral subspace of ϕ and denote by $Y = X_\phi(\text{Sp}(\phi_M))$. We know that $\text{Sp}(\phi_Y) \subset \text{Sp}(\phi_M)$, and as M is a maximal spectral subspace, $Y \subset M$. Take $x \in M$. Then $\text{sp}_\phi(x) = \text{sp}_{\phi_M}(x) \subset \text{Sp}(\phi_M)$ and $x \in Y$, i.e., $M \subset Y$ and so $Y = M$. ■

REMARK. Given a closed set $F \subset \text{Sp}(\mathcal{A})$, it is clear that $X_\phi(F) = X_\phi(F \cap \text{Sp}(\phi))$.

In the context of Banach algebras, we use the following concepts, which were introduced by Apostol in [2].

DEFINITION 4.4. Given (Ω, τ) a topological space and X a Banach space, a *spectral capacity*, \mathcal{E} , is a map from closed sets of Ω , $\text{Clos}(\Omega)$, to the set of closed subspaces of X , $\text{Lat}(X)$, such that,

- (1) $\mathcal{E}(\emptyset) = \{0\}$ and $\mathcal{E}(\Omega) = X$.
- (2) $\mathcal{E}(\cap_{n=1}^\infty F_n) = \cap_{n=1}^\infty \mathcal{E}(F_n)$ for all closed set $F_n \subset \Omega$.
- (3) if $\cup_{j=1}^n \text{int } F_n = \Omega$ then $\sum_{j=1}^n \mathcal{E}(F_j) = X$.

The *support* of the spectral capacity \mathcal{E} is the set $\text{supp}(\mathcal{E}) := \cap_{\mathcal{E}(F)=X} F$. Besides, given $x \in X$, the set $\sigma_{\mathcal{E}}(x) = \cap_{x \in \mathcal{E}(F)} F$ is called the *spectrum* of x with regard to \mathcal{E} .

THEOREM 4.5. *Let \mathcal{A} be a semisimple, regular Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly non degenerate representation of \mathcal{A} in a Banach space X . Then $\mathcal{E} : F \mapsto X_\phi(F \cap \text{Sp}(\mathcal{A}))$, for every closed set $F \subset \text{Sp}(\mathcal{A} \oplus \text{Ce})$, is a spectral capacity from $\text{Sp}(\mathcal{A} \oplus \text{Ce})$ to X such that*

- (a) $\text{supp}(\mathcal{E}) \setminus \{\tau_\infty\} = \text{Sp}(\phi)$.

$$- (b) \sigma_{\mathcal{E}}(x) \setminus \{\tau_{\infty}\} = sp_{\phi}(x).$$

Proof: If F is a closed set in $Sp(\mathcal{A} \oplus Ce)$, $F \cap Sp(\mathcal{A})$ is a closed set $Sp(\mathcal{A})$. Now we are going to check the three conditions of a spectral capacity.

(i) Take $F = \emptyset$ and $x \in X_{\phi}(\emptyset)$. If $sp_{\phi}(x) = \emptyset$, $x = 0$ (by Corollary 3.8.). It is clear that $X_{\phi}(Sp(\mathcal{A})) = X$ because $sp_{\phi}(x) \subset Sp(\mathcal{A})$.

(ii) It is direct to show that $X_{\phi}((\cap_{n=1}^{\infty} F_n) \cap Sp(\mathcal{A})) = \cap_{n=1}^{\infty} X_{\phi}(F_n \cap Sp(\mathcal{A}))$.

(iii) Let us consider the canonical extension $\tilde{\phi} : \mathcal{A} \oplus Ce \rightarrow \mathcal{L}(X)$. $\mathcal{A} \oplus C$ is a semisimple, regular Banach algebra whose spectrum is compact and $Sp(\mathcal{A} \oplus Ce) = Sp(\mathcal{A}) \cup \{\tau_{\infty}\}$. In addition, we are going to show that $sp_{\phi}(x) \subset sp_{\tilde{\phi}}(x) \subset sp_{\phi}(x) \cup \{\tau_{\infty}\}$.

Take $\tau \in sp_{\phi}(x)$ and $\tilde{a} \in \mathcal{A} \oplus C$ such that $\tilde{\phi}(\tilde{a})(x) = 0$. We consider $b \in \mathcal{A}$ such that $\hat{b}(\tau) \neq 0$. Then $\tilde{a}b \in \mathcal{A}$ and $\phi(\tilde{a}b)x = \phi(b)\tilde{\phi}(\tilde{a})x = 0$. As $\tau \in sp_{\phi}(x)$, $0 = \widehat{\tilde{a}b}(\tau) = \hat{a}(\tau)\hat{b}(\tau)$ and so $0 = \hat{a}(\tau)$ and $\tau \in sp_{\tilde{\phi}}(x)$. Finally it is direct to prove $sp_{\tilde{\phi}}(x) \subset sp_{\phi}(x) \cup \{\tau_{\infty}\}$.

Now, let $\{F_j\}_{j=1}^n$ be a family of closed sets of $Sp(\mathcal{A} \oplus Ce)$ which satisfies $\cup_{j=1}^n \text{int } F_j = Sp(\mathcal{A} \oplus Ce)$. As $Sp(\mathcal{A} \oplus Ce)$ is a compact set, there exist $\{\tilde{a}_j\}_{j=1}^n$ which verify $\text{supp } \widehat{(\tilde{a}_j)} \subset F_j$ with $j \in \{1, \dots, n\}$ and $\sum_{j=1}^n \widehat{(\tilde{a}_j)}(\tau) = 1$ for all $\tau \in Sp(\mathcal{A} \oplus Ce)$. As $\mathcal{A} \oplus Ce$ is a semisimple algebra, $e = \sum_{j=1}^n \tilde{a}_j$ and for all $x \in X$ it can be written

$$x = \tilde{\phi}(e)x = \sum_{j=1}^n \tilde{\phi}(\tilde{a}_j)x$$

and $sp_{\phi}(\tilde{\phi}(\tilde{a}_j)x) \subset sp_{\tilde{\phi}}(\tilde{\phi}(\tilde{a}_j)x) \subset \text{supp } \widehat{(\tilde{a}_j)} \subset F_j$ with $1 \leq j \leq n$. So it holds that $sp_{\phi}(\tilde{\phi}(\tilde{a}_j)x) \subset F_j \cap Sp(\mathcal{A})$, $\tilde{\phi}(\tilde{a}_j)x \in \mathcal{E}(F_j)$ and $X = \mathcal{E}(F_1) + \mathcal{E}(F_2) + \dots + \mathcal{E}(F_n)$.

To prove (a), it is clear $\text{supp } \mathcal{E} \setminus \{\tau_{\infty}\} \subset Sp(\phi)$. Take a closed set $F \subset Sp(\mathcal{A} \oplus Ce)$ such that $\mathcal{E}(F) = X_{\phi}(F \cap Sp(\mathcal{A})) = X$. Then, for all $x \in X$

$$sp_{\phi}(x) \subset sp(\phi_{X_{\phi}(F \cap Sp(\mathcal{A}))}) \subset F \cap Sp(\mathcal{A})$$

holds. By Corollary 3.9, $Sp(\phi) \subset F \cap Sp(\mathcal{A})$ and $Sp(\phi) \subset \text{supp } \mathcal{E} \setminus \{\tau_{\infty}\}$.

To check (b) it is direct to show that $\sigma_{\mathcal{E}}(x) \setminus \{\tau_{\infty}\} \subset sp_{\phi}(x)$. Take a closed set $F \subset Sp(\mathcal{A} \oplus Ce)$ such that $x \in \mathcal{E}(F) = X_{\phi}(F \cap Sp(\mathcal{A}))$. Then, it holds that

$$sp_{\phi}(x) \subset sp(\phi_{X_{\phi}(F \cap Sp(\mathcal{A}))}) \subset F \cap Sp(\mathcal{A})$$

and $sp_{\phi}(x) \subset \sigma_{\mathcal{E}}(x) \setminus \{\tau_{\infty}\}$. ■

5. Extension of Representations to $M(\mathcal{A})$

Let \mathcal{A} be a Banach algebra. A mapping $T : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ is called a *multiplier* on \mathcal{A} if the identity $aT(b) = T(a)b$ holds for all $a, b \in \mathcal{A}$. If \mathcal{A} is an algebra *without order* (i.e. if $ab = 0$ for all $b \in \mathcal{A}$

then $a = 0$), then \mathcal{A} may be regarded as a subset of $M(\mathcal{A})$ and $M(\mathcal{A})$ is an unitary, closed, commutative subalgebra of $\mathcal{L}(\mathcal{A})$ [14]. If \mathcal{A} is a semisimple algebra, $M(\mathcal{A})$ is also semisimple (see Larsen), but in the general case the regularity of \mathcal{A} does not make $M(\mathcal{A})$ to be regular [14].

The spectrum, $\text{Sp}(M(\mathcal{A}))$, of the multiplier algebra can be represented [14] as the disjoint union of $\text{Sp}(\mathcal{A})$ and $H(\mathcal{A})$, where $\text{Sp}(\mathcal{A})$ is canonically embedded in $\text{Sp}(M(\mathcal{A}))$, and $H(\mathcal{A})$ is the hull of \mathcal{A} in $\text{Sp}(M(\mathcal{A}))$. The hull-kernel topology and the Gelfand topology of $\text{Sp}(\mathcal{A})$ coincide with the relative hull-kernel topology and the Gelfand topology induced by $\text{Sp}(M(\mathcal{A}))$, and $\text{Sp}(\mathcal{A})$ is hull-kernel and Gelfand open in $\text{Sp}(M(\mathcal{A}))$. Besides it is defined

$$M_0(\mathcal{A}) := \{T \in M(\mathcal{A}) \mid \hat{T}_{\text{Sp}(\mathcal{A})} \equiv 0 \text{ at infinity in the Gelfand topology of } \text{Sp}(\mathcal{A})\}.$$

Given $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly continuous representation and $T \in M(\mathcal{A})$, we are interested on studying the action of T over X . We will denote this new operator by $\Phi(T)$ and will say $x \in D(\Phi(T))$ if there exists $y \in X$ such that

$$\phi(T(a))x = \phi(a)y$$

for all $a \in \mathcal{A}$ and $\Phi(x) = y$ [9]. $\Phi(T) : D(\Phi(T)) \rightarrow X$ is a closed linear operator and it is direct to show the following properties.

PROPOSITION 5.1. *Given $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly continuous representation, $T, S \in M(\mathcal{A})$ and $(D(\Phi(T)), \Phi(T))$, $(D(\Phi(S)), \Phi(S))$ defined as above, then*

- (i) $\phi(\mathcal{A})X \subset D(\Phi(T))$, $\Phi(T)\phi(a)x = \phi(T(a))x$ for all $a \in \mathcal{A}$ and $x \in X$, and $\phi(T(a))x = \phi(a)\Phi(T)x$ for all $a \in \mathcal{A}$ and $x \in D(\Phi(T))$.
- (ii) $D(\Phi(S)) \cap D(\Phi(T)) \subset D(\Phi(S+T))$ and $\Phi(S)x + \Phi(T)x = \Phi(S+T)x$ for all $x \in D(\Phi(S)) \cap D(\Phi(T))$.
- (iii) $D(\Phi(ST)) = D(\Phi(TS))$ and $\Phi(ST)x = \Phi(TS)x$ for all $x \in D(\Phi(ST))$.
- (iv) $D(\Phi(T)\Phi(S)) \subset D(\Phi(ST))$ and $\Phi(T)\Phi(S)x = \Phi(TS)x$ for all $x \in D(\Phi(T)\Phi(S))$.

Then, if $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ is a strongly continuous representation, ϕ induces a new representation $\Phi : M(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{L}(X)$. If \mathcal{A} has a bounded approximate identity $(e_\lambda)_{\lambda \in \Lambda}$ for which $\phi(e_\lambda)x \rightarrow x$ for each $x \in X$, by the Cohen factorization theorem we get that $\Phi : M(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{L}(X)$ (see [12]). But all along, we will not suppose that \mathcal{A} has a bounded approximate identity.

DEFINITION 5.2. Let \mathcal{A} be a semisimple, regular Banach algebra and $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly continuous representation, $\Phi : M(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{L}(X)$ defined as above and $x \in X$. Then

- (a) $\text{Sp}(\Phi) := h(\ker(\Phi)) = \{\varphi \in \text{Sp}(M(\mathcal{A})) \mid \hat{T}(\varphi) = 0 \text{ for any } T \in \ker(\Phi)\}$.
- (b) $\text{sp}_\Phi(x) := h(\ker(I_x^\Phi)) = \{\varphi \in \text{Sp}(M(\mathcal{A})) \mid \hat{T}(\varphi) = 0 \text{ with } x \in D(\Phi(T)) \text{ and } \Phi(T)x = 0\}$.

An immediate question is to know which is the relationship between $\text{sp}_\phi(x)$ and $\text{sp}_\Phi(x)$ with $x \in X$. For doing this, we will use the following lemma.

LEMMA 5.3. *If $x \in X$, $T \in M(\mathcal{A})$ and $\phi(T(a))x = 0$ for all $a \in \mathcal{A}$ (where \mathcal{A} and ϕ are defined above), then $x \in D(\Phi(T))$ and $\Phi(T)x = 0$.*

Proof: Take the definition of $\Phi(T)x$ with $y = 0$. As $\phi(T(a))x = \phi(a)y = 0$ the lemma is proved. ■

THEOREM 5.4. *Let \mathcal{A} be a semisimple, regular Banach algebra, $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly continuous representation, $\Phi : M(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{C}(X)$ defined as above and $x \in X$. Then*

- (a) $\text{sp}_\phi(x) = \text{sp}_\Phi(x) \cap \text{Sp}(\mathcal{A})$.
- (b) $\text{sp}_\Phi(x) \subset \text{Sp}(\Phi)$.
- (c) $\text{Sp}(\phi) = \text{Sp}(\Phi) \cap \text{Sp}(\mathcal{A})$.

Proof: (a) It is direct to prove that $\text{sp}_\Phi(x) \cap \text{Sp}(\mathcal{A}) \subset \text{sp}_\phi(x)$. Now take $\tau \in \text{Sp}_\phi(x)$ and $T \in M(\mathcal{A})$ such that $x \in D(\Phi(T))$ and $\Phi(T)x = 0$. Then $\phi(T(a))x = 0$ for all $a \in \mathcal{A}$, and as $\tau \in \text{sp}_\phi(x)$ we have that $0 = \widehat{T(a)}(\tau) = \hat{T}(\tau)\hat{a}(\tau)$ for all $a \in \mathcal{A}$. So $\hat{T}(\tau) = 0$ and $\tau \in \text{sp}_\Phi(x)$.

(b) Take $\tau \in \text{sp}_\Phi(x)$ and $T \in M(\mathcal{A})$ such that $\Phi(T) = 0$. Then for all $a \in \mathcal{A}$ $\phi(T(a))x = 0$. By Lemma 5.3, $x \in D(\Phi(T))$ and $\Phi(T)x = 0$. As $\tau \in \text{sp}_\Phi(x)$, $\hat{T}(\tau) = 0$ and $\tau \in \text{Sp}(\Phi)$.

(c) It is clear that $\text{Sp}(\Phi) \cap \text{Sp}(\mathcal{A}) \subset \text{Sp}(\phi)$. Now, the Corollary 3.9 and (b) we have that

$$\text{Sp}(\phi) = \overline{\bigcup_{x \in X} \text{sp}_\phi(x)} \subset \overline{\bigcup_{x \in X} \text{sp}_\Phi(x)} \subset \text{Sp}(\Phi). \quad \blacksquare$$

Using this theorem, some properties which are well-known in the case we take \mathcal{A} with a bounded approximate identity can be proved [19].

PROPOSITION 5.5. *Let \mathcal{A} , $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ and $\Phi : M(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{C}(X)$ be defined as above, $x \in X$, and $T \in M(\mathcal{A})$. Then*

- (a) $\text{sp}_\Phi(x) = \emptyset$ if and only if $x = 0$.
- (b) $\text{sp}_\phi(\Phi(T)x) \subset \text{sp}_\phi(x) \cap \text{supp}(\hat{T})$ for all $x \in D(\Phi(T))$.
- (c) if $x \in D(\Phi(T))$, and $\hat{T} \equiv 0$ in a neighbourhood of $\text{sp}_\phi(x)$, then $\Phi(T)x = 0$.
- (d) if $\hat{T} \equiv 0$ in a neighbourhood of $\text{Sp}(\Phi)$, then $\Phi(T) = 0$.

Proof: (a) It is direct to prove it from Theorem 5.4.(a) and Corollary 3.8.

(b) It is easy to show that $\text{sp}_\Phi(\Phi(T)x) \subset \text{sp}_\Phi(x)$. Now take $\tau \in \text{Sp}(\mathcal{A}) \setminus \text{supp}(\hat{T})$. $\text{supp}(\hat{T})$ is a closed set of $\text{Sp}(M(\mathcal{A}))$ and $\text{supp}(\hat{T}) \cap \text{Sp}(\mathcal{A})$ is a closed in $\text{Sp}(\mathcal{A})$. As \mathcal{A} is a regular Banach algebra, there exists $a \in \mathcal{A}$ such that $\hat{a}(\tau) = 1$ and $\hat{a} \equiv 0$ in $\text{supp}(\hat{T}) \cap \text{Sp}(\mathcal{A})$. Now we consider $T(a)$. For any $\varphi \in \text{Sp}(\mathcal{A})$, it holds that

$$\varphi(T(a)) = \widehat{T(a)}(\varphi) = \hat{T}(\varphi)\hat{a}(\varphi) = 0.$$

Then $(\mathcal{A}$ is a semisimple algebra), $T(a) = 0$ and $\phi(a)\Phi(T)x = \phi(T(a))x = 0$ with $\hat{a}(\tau) = 1$ and then $\tau \notin \text{sp}_\Phi(\Phi(T)x)$.

(c) It is directly got from (b) and Corollary 3.8.

(d) It is a consequence of Theorem 5.4.(c), $\text{sp}_\Phi(x) \subset \text{Sp}(\phi)$ and (c). ■

The remainder of this section will be devoted to some properties of the operator $\Phi(T)$. These questions have been studied in several papers before, see for instance [10], [12]. Now we will remind some basic definitions and facts in spectral theory of operators.

A linear operator $(S, D(S))$ over a complex Banach space X has the *single valued extension property*, *SVEP*, if for any open set $U \subset \mathbb{C}$ the only function $f : U \rightarrow D(S)$ such that $(S - \lambda)f(\lambda) = 0$ for all $\lambda \in U$ is the constant function $f \equiv 0$.

For an operator $(S, D(S))$ which satisfies the property *SVEP*, it is defined the *local resolvent* of S at $x \in X$, $\rho_S(x)$, as the set of all $\lambda \in \mathbb{C} \cup \{\infty\} := \overline{\mathbb{C}}$ for which there exists an analytic function $f : U \rightarrow X$ on some open neighbourhood U of λ , so that $(S - \mu)f(\mu) = x$ holds for all $\mu \in U$. The complement $\sigma_S(x) := \overline{\mathbb{C}} \setminus \rho_S(x)$ is called the *local spectrum* of S at $x \in X$.

An operator $S \in \mathcal{C}(X)$ is said to have *Dunford's property (C)* if the subspace $X_S(F) := \{x \in X \mid \sigma_S(x) \subset F\}$ is closed for every closed $F \subset \overline{\mathbb{C}}$. Moreover S is called *quasi-decomposable* if $X_S(F)$ is closed for each closed $F \subset \overline{\mathbb{C}}$ and for every finite open covering $\{U_1, \dots, U_n\}$ of $\overline{\mathbb{C}}$, the sum $X_S(\overline{U_1}) + \dots + X_S(\overline{U_n})$ is dense in X . S is called *decomposable* if for every finite open covering $\{U_1, \dots, U_n\}$ of $\overline{\mathbb{C}}$, there exists S -invariant closed linear subspaces Y_1, \dots, Y_n such that $Y_1 + \dots + Y_n = X$ and $\sigma(T_{Y_j}) \subset U_j$ for $j = 1, \dots, n$ [10].

$S \in \mathcal{C}(X)$ is decomposable if and only if there exists a spectral capacity for S , $\mathcal{E} : \text{Clos}(\overline{\mathbb{C}}) \rightarrow \text{Inv}(S)$ such that $\sigma(T_{\mathcal{E}(F)}) \subset F$ for all closed set $F \subset \overline{\mathbb{C}}$. Besides, it can be shown that if S is decomposable, then $\mathcal{E}(F) = X_S(F)$ for all $F \in \text{Clos}(\overline{\mathbb{C}})$ [20].

The particular case $X = \mathcal{A}$ has been deeply studied. In this situation $\phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{A})$ and $\phi(a) = L_a$, where $L_a(b) = ab$ for all $b \in \mathcal{A}$, $\text{sp}_\Phi(a) = \text{supp}(\hat{a})$, for all $a \in \mathcal{A}$ and $\text{Sp}(\phi) = \text{Sp}(\mathcal{A})$.

It is immediate to prove that $\Phi : M(\mathcal{A}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{A})$ is the canonical continuous inclusion. For $T \in M(\mathcal{A})$ it is said that

- (a) T has *natural local spectra* if $\text{sp}_T(a) = \overline{\hat{T}(\text{supp}(\hat{a}))}$ for all $a \in \mathcal{A}$.

- (b) T has natural spectrum if $\sigma_{M(A)}(T) = \overline{\hat{T}(\text{Sp}(A))}$.

It is known that every multiplier with natural local spectra has natural spectrum. For $T \in M_0(A)$, some equivalent statements to having natural local spectra have been proved [10]. We remark the following one.

THEOREM 5.6 ([10]). *Let A be a regular semisimple Banach algebra and $T \in M_0(A)$. Then T has natural local spectra if and only if T is decomposable.*

In the general case, $\phi : A \rightarrow \mathcal{L}(X)$ is a strongly non degenerate representation with A a regular, semisimple Banach algebra. Two definitions have been introduced [19] to replace the properties of having natural local spectra and natural spectrum. It is said that a multiplier $T \in M(A)$ with $\Phi(T) \in SVEP$

- (a) has the property (L) if $\text{sp}_{\Phi(T)}(x) = \overline{\hat{T}(\text{sp}_{\phi}(x))}$ for all $x \in X$.
- (b) has the property (G) if $\sigma_{\mathcal{L}(X)}(T) = \overline{\hat{T}(\text{Sp}(\phi))}$.

If $\Phi : M(A) \rightarrow \mathcal{L}(X)$ then for any multiplier $T \in M(A)$ verifying property (L) verifies property (G). Even more Neuman has proved the following theorem.

THEOREM 5.7 ([Ne]). *Suppose A is a regular semisimple Tauberian Banach algebra with a bounded approximate identity (e_λ) and $\phi : A \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a continuous algebra homomorphism with the property that $\phi(e_\lambda)x \rightarrow x$. Then*

- (i) ϕ is strongly non degenerate and has an unique extension to a continuous unital algebra homomorphism $\Phi : M(A) \rightarrow \mathcal{L}(X)$.
- (ii) if the multiplier $T \in M(A)$ is decomposable on A then $\Phi(T)$ is decomposable and verifies properties (L) and (G).

We are ready to show the last two theorems of this section. The first one is an extension of one part of the Theorem 5.7.

THEOREM 5.8. *Suppose A is a regular semisimple Banach algebra, $\phi : A \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a strongly non degenerate representation and $T \in M_0(A)$ such that has the property (L), and $\Phi(T)$ has SVEP. Then $\Phi(T)$ is decomposable.*

Proof: If T has the property (L), then we claim $X_{\Phi(T)}(F) = X_{\phi}(\hat{T}^{-1}(F))$ for all $F \in \text{Clos}(\overline{C})$. Take $x \in X_{\Phi(T)}(F)$. Then $\text{sp}_{\phi}(x) \subset \hat{T}^{-1}(\hat{T}(\text{sp}_{\phi}(x))) \subset \hat{T}^{-1}(F)$. Conversely, if $x \in X_{\phi}(\hat{T}^{-1}(F))$, then $\text{sp}_{\Phi(T)}(x) = \overline{\hat{T}(\text{sp}_{\phi}(x))} = \overline{\hat{T}(\hat{T}^{-1}(F))} \subset F$ as we want.

Therefore we have to prove that $\text{Clos}(\overline{C}) \rightarrow \text{Inv}(T)$, and that $F \mapsto X_\phi(\hat{T}^{-1}(F))$ is a spectral capacity for T . Conditions (1), (2) of Definition 4.4 are easy to check. We have that

$$\sigma(\Phi(T)_{X_\phi(\hat{T}^{-1}(F))}) = \bigcup_{x \in X_\phi(\hat{T}^{-1}(F))} \text{sp}_{\Phi(T)}(x) = \bigcup_{x \in X_\phi(\hat{T}^{-1}(F))} \overline{T(\text{sp}_\phi(x))} \subset F$$

by Proposition 3.7 of [7]. The Proposition 5.5.(ii) that implies $X_\phi(\hat{T}^{-1}(F))$ is invariant by $\Phi(T)$. So, we just have to prove condition (3) of the Definition 4.4. It is enough to prove it with $\{U, V\}$ an open covering of \overline{C} . Suppose $0 \in U$. As $T \in M_O(\mathcal{A})$ and \hat{T} is hull-kernel continuous on $\text{Sp}(\mathcal{A})$, $\hat{T}^{-1}(U)$ is an open neighbourhood of ∞ , $\hat{T}^{-1}(\overline{C} \setminus U)$ is a compact set on $\text{Sp}(\mathcal{A})$ and $\hat{T}^{-1}(\overline{C} \setminus V)$ is a closed set which is disjoint with $\hat{T}^{-1}(\overline{C} \setminus U)$. Then (\mathcal{A} is regular) there exists $a \in \mathcal{A}$ such that $\hat{a} \equiv 1$ on $\hat{T}^{-1}(\overline{C} \setminus U)$ and $\hat{a} \equiv 0$ on $\hat{T}^{-1}(\overline{C} \setminus V)$. This implies that $\text{supp}(\hat{a}) \subset \hat{T}^{-1}(\overline{U})$ and that $\text{supp}(1 - \hat{a}) \subset \hat{T}^{-1}(\overline{V})$ and for all $x \in X$ we have the decomposition $x = \phi(a)x + x - \phi(a)x = \phi(a)x + \Phi(I - a)x$ with $\phi(a)x \subset \text{supp}(\hat{a}) \subset \hat{T}^{-1}(\overline{U})$ and $x - \phi(a)x \subset \text{supp}(1 - \hat{a}) \subset \hat{T}^{-1}(\overline{V})$ as we claimed. ■

THEOREM 5.9. *Suppose \mathcal{A} is a regular, semisimple, Banach algebra, $\phi: \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{L}(X)$ a representation strongly non-degenerate such that $\phi(\mathcal{A})X$ is dense in X , $T \in M(\mathcal{A})$ a decomposable multiplier with natural local spectra and the property (L). Then $\Phi(T)$ is quasi-decomposable.*

Proof: As T has the property (L) following the proof of Theorem 5.8, it can be also proved that $X_{\Phi(T)}(F) = X_\phi(\hat{T}^{-1}(F))$ and that $X_{\Phi(T)}(F)$ is closed.

Let $\{U_1, U_2, \dots, U_n\}$ be an open covering of \overline{C} . As T is a decomposable multiplier on \mathcal{A} there exists maximal spectral subspaces for T , $\{\mathcal{A}_T(\overline{U}_1), \mathcal{A}_T(\overline{U}_2), \dots, \mathcal{A}_T(\overline{U}_n)\}$ and $\mathcal{A} = \mathcal{A}_T(\overline{U}_1) + \mathcal{A}_T(\overline{U}_2) + \dots + \mathcal{A}_T(\overline{U}_n)$ where $\mathcal{A}_T(\overline{U}_j) = \{a \in \mathcal{A} \mid \text{sp}_T(a_j) \subset \overline{U}_j\}$ with $j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Then

$$\begin{aligned} \phi(\mathcal{A})X &= \phi(\mathcal{A}_T(\overline{U}_1))X + \phi(\mathcal{A}_T(\overline{U}_2))X + \dots + \phi(\mathcal{A}_T(\overline{U}_n))X \\ &\subset X_T(\overline{U}_1) + X_T(\overline{U}_2) + \dots + X_T(\overline{U}_n) \end{aligned}$$

due to $\text{sp}_{\Phi(T)}(\phi(a_j)x) = \overline{\hat{T}(\text{sp}_\phi(\phi(a_j)x))} = \overline{\hat{T}(\text{supp}(\hat{a}_j))} = \text{sp}_T(a_j) \subset \overline{U}_j$, because T has natural local spectra. As $\phi(\mathcal{A})X$ is dense in X , $X_T(\overline{U}_1) + X_T(\overline{U}_2) + \dots + X_T(\overline{U}_n)$ is dense in X . ■

6. Two Classical Examples

In this section we will comment two examples which have been considered in several papers. The first one is related with functional calculus defined for hermitian elements on a Banach algebra [4], [11]. The second one is the most important case of representation of the Banach algebra, $\mathcal{A} = L^1(G)$ where G is a locally compact abelian group [6], [9].

6.1 Hermitian elements and elements with growth of degree α

Let \mathcal{A} be a complex Banach algebra with unit element e . An element $a \in \mathcal{A}$ is said to be *hermitian* if $\|e^{it a}\| = 1$ for all $t \in \mathbb{R}$. We will say that a is an element with *growth of degree α* with $\alpha \geq 0$ if $\|e^{it a}\| \leq c(1 + |t|)^\alpha$ for all $t \in \mathbb{R}$. The spectrum of hermitian elements and elements with growth of degree α is a subset of \mathbb{R} .

For these classes of elements Baillet proved the following theorem.

THEOREM 6.1. *Let \mathcal{A} be a Banach algebra with unity e , $a \in \mathcal{A}$ an element with growth of degree α and $\Omega \subset \mathbb{R}$ an open neighbourhood of $\sigma(a)$. Then there exists a unique homomorphism $\Phi : f \mapsto \Phi(f)$, from $C^{(k)}(\Omega)$ (with $k = [\alpha + 3/2]$) to \mathcal{A} which satisfies the following properties:*

- (i) Φ is continuous.
- (ii) $\Phi(t \rightarrow 1) = e$ and $\Phi(t \rightarrow t) = a$.
- (iii) if f is null over a neighbourhood of $\sigma(a)$ then $\Phi(f) = 0$.
- (iv) $\sigma(\Phi(f)) = f(\sigma(a))$.

If $a = T \in \mathcal{L}(X)$, then $\Phi : C^{(k)}(\Omega) \rightarrow \mathcal{L}(X)$ and $\Phi(f)$ is decomposable for all $f \in C^{(k)}(\Omega)$, and in particular T is decomposable.

6.2 The Banach algebra $L^1(G)$

Let G be a locally compact abelian group, $L^1(G)$ the space of complex valued functions on G with regard to the Haar measure and $M(G)$ the Banach algebra of regular complex Borel measures on G . A strongly continuous representation of G by means of isometries on a Banach space X , is a map $U : G \rightarrow \mathcal{L}(X)$ which satisfies

- (i) $U(s+t) = U(s)U(t)$ for all $s, t \in G$, $U(0) = I$.
- (ii) $\|U(s)x\| = \|x\|$ for $s \in G$ and $x \in X$.
- (iii) $G \rightarrow X$, $s \mapsto U(s)x$ is continuous for each $x \in X$.

It is known that under these conditions (G a locally compact abelian group, and U a strongly continuous representation of G), there exists a continuous algebra homomorphism

$$\begin{aligned} U : M(G) &\rightarrow \mathcal{L}(X) \\ \mu &\mapsto U(\mu) := \int_G U(s) d\mu(s) \end{aligned}$$

with $\|U\| = 1$. In particular, if $f \in L^1(G)$, then $U(f) = \int_G f(s)U(s)ds$. For the representation U , Arvenson [3] introduced the concepts of spectrum, local spectra, and spectral subspaces which are equal to the analogous concepts of U taken in $L^1(G)$.

As application for all this, take $X = L^p(G)$ with $1 \leq p \leq \infty$. Then for all $f \in L^1(G)$, $U_p(f) \in \mathcal{L}(L^p(G))$ and $U_p(f)(g) = f * g$ for all $g \in L^p(G)$. Then $U_p(f)$ is a decomposable operator for $f \in L^1(G)$ and $1 \leq p \leq \infty$. Besides $U_p(f)(g) = U_q(f)(g)$ for all $g \in L^p(G) \cap L^q(G)$ ($U_p(f)$ and $U_q(f)$ are consistent) and by a result of Albrecht [1, Corollary 2.6.]

$$\sigma_{\mathcal{L}(L^p(G))}(U_p(f)) = \sigma_{\mathcal{L}(L^q(G))}(U_q(f))$$

with $1 \leq p, q < \infty$.

Acknowledgements

This research has been partially supported by the Spanish DGES, Proyecto PB97-0094 and by a FPI Grant DGESIC.

Referencias

- [1] E. ALBRECHT, Spectral interpolation, *Oper. Theory Adv. Appl.*, vol. 14, Birkhäuser, Basel, 1984, pp. 13-37.
- [2] C. APOSTOL, Spectral decompositions and functional calculus, *Rev. Roum. Math. Pures et Appl.* Tome XIII 10 (1968), 1481-1528 (1968)
- [3] W. ARVESON, The harmonic analysis of automorphism groups, *Proc. of Symposia in Pure Maths.* Amer. Math. Soc. vol.38, Providence 1982, pp. 199-269.
- [4] M. BAILLET, Analyse spectral des opérateurs hermitiens d'un espace de Banach, *J. London Math. Soc.* 19 (1979), 497-508.
- [5] I. COLOJOARA and C. FOIAS, Theory of generalized spectral operators, *Mathematics and its application*, V.9 Gordon and Breach, New York, 1968.
- [6] C. D'ANTONI, R. LONGO and L. ZSIDO, A spectral mapping theorem for locally compact groups of operators, *Pacific Journal of Mathematics* 103, (1981) 17-24.
- [7] I. ERDELYI and W. SHENGWANG A Local Spectral Theory for Closed Operators, London Math. Soc., Lecture Notes Series 105, Cambridge U.P., Cambridge 1985.
- [8] J. ESCHMEIER, Operator decomposability and weakly continuous representations of locally compact abelian groups, *J. Operator Theory* 7, (1982), 201-208.
- [9] J. ESCHMEIER, Spectral decompositions and decomposable multipliers, *Manuscripta Math.* 51, (1985), 201-240.

- [10] J. ESCHMEIER, K.B. LAURSEN and M.M. NEUMANN, Multipliers with Natural Local Spectra on Commutative Banach Algebras, *J. Funct. Anal.* **138**, (1996), 273-294.
- [11] H. KÖNIG, A Functional Calculus for Hermitian Elements of Complex Banach Algebras, *Arch. Math.* **XXVIII**, (1977), 422-430.
- [12] R. KANTROWITZ and M.M. NEUMANN, On certain Banach algebras of vector-valued functions in: *Function Spaces, the Second Conference* (ed. by K.Jarosz), 223-242, Marcel-Dekker, New York 1995.
- [13] R. LARSEN, *Banach Algebras, An Introduction*, Marcel Dekker, New York, 1973.
- [14] R. LARSEN, *An Introduction to the Theory of Multipliers*, Springer-Verlag, Berlin, 1971.
- [15] K.B. LAURSEN and M.M. NEUMANN, Decomposable operators and automatic continuity, *J. Operator Theory* **15** (1986), 33-51.
- [16] K.B. LAURSEN and M.M. NEUMANN, Decomposable multipliers and applications to harmonic analysis, *Studia Mathematica* **101** (1992), 193-213.
- [17] L.H. LOOMIS, *An Introduction to Abstract Harmonic Analysis*, D. Van Nostrand Company, Inc. New York, 1953.
- [18] F-Y. MAEDA, Generalized spectral operators on locally convex spaces, *Pacific J. Math.* **13**, (1963), 177-192.
- [19] M.M. NEUMANN, Natural spectrum, natural local spectra, and spectral mapping theorems for multipliers on Banach algebras in: *Banach Algebras'97* (ed. by E.Albrecht and M. Mathieu), 377-395, Walter de Gruyter, New York 1998.
- [20] F.H. VASILESCU, *Analytic Functional Calculus, Mathematics and its Applications* D. Reidel Publishing Company, London, 1982.

Un estimador robusto con información auxiliar univariante

M. Ruiz Espejo

Departamento de Estadística.

Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales.

Universidad Complutense. 28223 Madrid.

Abstract

We introduce a class of estimators linear combination of the classic ratio and product estimators, and calculate its bias and mean square error. With an adequate choice of parameter k , the proposed estimator is approximately of minimum mean square error in the class, and is more precise than the classic estimators on which it is based. In practice, it is useful for its administrative simplicity, additional ease use and robustness for interest and auxiliary variates very positive or negatively correlated.

1. Introducción

Consideremos una población finita de tamaño N , con unidades numeradas de 1 a N para su identificación. Disponemos de una variable auxiliar x , conocida para todas las unidades de la población. Sea y la variable de interés, observable en las n ($0 < n < N$) unidades de la muestra obtenida por muestreo aleatorio simple sin reemplazamiento de la población. Sean \bar{X} e \bar{Y} las medias poblacionales de las variables x e y , respectivamente, así como \bar{x} e \bar{y} las respectivas medias muestrales.

La clase de estimadores propuesta será la familia de combinaciones lineales de los estimadores usuales de razón t_R , y producto t_P . Así tenemos

$$t_{RP} = kt_R + (1 - k)t_P = \bar{y} \left[k \frac{\bar{X}}{\bar{x}} + (1 - k) \frac{\bar{y}}{\bar{X}} \right] \quad (1)$$

donde k es un parámetro de la recta real por determinar.

El tipo de estimadores (1) fueron originados a partir de trabajos pioneros como el de Olkin (1958), recientemente sumariados por Rao (1988); su propósito es estimar la función paramétrica media poblacional \bar{Y} . La ventaja de los estimadores propuestos se

basa en su simplicidad ya que sólo requiere una variable auxiliar x , con su consecuente simplicidad administrativa en la práctica, como opuesto al caso multivariante. La ventaja común es su eficiencia con respecto a los estimadores clásicos elementales con los cuales se construye.

2. Sesgo de t_{RP}

Denotando por $B(\cdot)$ al sesgo,

$$B(t_{RP}) = E(t_{RP}) - \bar{Y} = kB(t_R) + (1-k)B(t_P),$$

y sustituyendo los sesgos $B(t_R)$ y $B(t_P)$ dados por Grosbras (1987, pags. 132 y 149) bajo muestreo aleatorio simple sin reemplazamiento, tenemos

$$B(t_{RP}) = \frac{N-n}{Nn} \left[k \left(\frac{\bar{Y}}{\bar{X}^2} S_x^2 - \frac{2S_{xy}}{\bar{X}} \right) + \frac{S_{xy}}{\bar{X}} \right] \quad (2)$$

donde S_x^2 es la cuasivarianza poblacional de la variable x y S_{xy} la cuasicovarianza de las variables x e y .

Igualando $B(t_{RP})$ a 0, el estimador t_{RP} es aproximadamente insesgado si

$$k = \frac{S_{xy}}{2S_{xy} - RS_x^2}, \quad (3)$$

siendo $R = \frac{\bar{Y}}{\bar{X}}$ la razón poblacional.

Con (3), el valor de k proporciona estimadores con sesgo aproximadamente nulo, pero en cualquier caso y para k arbitrario, el sesgo de t_{RP} dado en (2) es asintóticamente nulo cuando el tamaño muestral n crece.

3. Error cuadrático medio de t_{RP}

Denotando por $ECM(\cdot)$ el error cuadrático medio, tenemos

$$\begin{aligned} ECM(t_{RP}) &= E(t_{RP} - \bar{Y})^2 = E[k(t_R - \bar{Y}) + (1-k)(t_P - \bar{Y})]^2 \\ &= k^2 ECM(t_R) + (1-k)^2 ECM(t_P) + 2k(1-k)E[(t_R - \bar{Y})(t_P - \bar{Y})] \end{aligned} \quad (4)$$

Sustituyendo $ECM(t_R)$ y $ECM(t_P)$ dados aproximadamente en Grosbras y teniendo en cuenta que

$$E[(t_R - \bar{Y})(t_P - \bar{Y})] = E(t_R t_P) - \bar{Y}[E(t_R) + E(t_P)] + \bar{Y}^2 \quad (5)$$

como los sesgos son conocidos aproximadamente (Grosbras, 1987) y además $t_R t_P = \bar{y}^2$, obtenemos de (5) que

$$E[(t_R - \bar{Y})(t_P - \bar{Y})] = \frac{N-n}{Nn} (S_y^2 - R^2 S_x^2) \quad (6)$$

Usando (6), la fórmula (4) es aproximadamente

$$ECM(t_{RP}) \doteq \frac{N-n}{Nn} [S_y^2 + (1-2k)2RS_{xy} + (2k-1)^2 R^2 S_x^2]. \quad (7)$$

La fórmula (7) se minimiza eligiendo un valor adecuado de k en la recta real,

$$\frac{d[ECM(t_{RP})]}{dk} = \frac{N-n}{Nn} [-4RS_{xy} + 4(2k-1)R^2 S_x^2] = 0,$$

de donde

$$k = k' = \frac{1}{2} + \frac{S_{xy}}{2RS_x^2}. \quad (8)$$

Obviamente, k' es el mínimo de (7), ya que

$$\frac{d^2[ECM(t_{RP})]}{dk^2} = \frac{N-n}{Nn} 8R^2 S_x^2 > 0.$$

Sustituyendo k' en (2) y (7), obtenemos el sesgo y el error cuadrático medio aproximados

$$B(t'_{RP}) \doteq \frac{N-n}{Nn} \left[\frac{1}{2\bar{X}} \left(RS_x^2 + S_{xy} - \frac{2S_{xy}^2}{RS_x^2} \right) \right]$$

y

$$ECM(t'_{RP}) \doteq \frac{N-n}{Nn} \left[S_y^2 - \frac{S_{xy}^2}{S_x^4} \left(2S_x^2 - \frac{1}{R^2} \right) \right]$$

Comparando la precisión de t'_{RP} frente al estimador de regresión lineal usual t_{RG} (Cochran, 1977), tendremos

$$V(t_{RG}) \doteq \frac{N-n}{Nn} S_y^2 (1 - \rho^2) \geq ECM(t'_{RP})$$

si y sólo si $S_x^2 R^2 \geq 1$. Esta última condición nos indica en que casos el estimador t'_{RP} es más deseable que el estimador de regresión t_{RG} .

También se deduce que t_{RP} , con k' dada en (8), mejora uniformemente los estimadores básicos t_R y t_P (obtenidos respectivamente para $k = 1$ y $k = 0$). Así, t_{RP} con k' es un estimador eficiente cuando las variables de interés y auxiliar están muy correlacionadas. Estimando adecuadamente k mediante una muestra piloto o con datos de la muestra (ver Ruiz, 1988) y considerando k como una constante fijada en la recta real, t_{RP} es un estimador aproximadamente de error cuadrático medio mínimo uniformemente en la clase, por lo que resulta más preciso que los estimadores de razón y producto, en los que está basado.

El estimador propuesto t_{RP} con k' se manifiesta muy robusto bajo la hipótesis general de que las variables x y y están fuertemente correlacionadas, obteniéndose estimadores t_{RP} más eficientes que t_R y t_P , respectivamente, en los casos en que éstos son deseables. Si ambas variables están positivamente correlacionadas, el estimador t_R es muy apropiado; si estuvieran negativamente correlacionadas, el estimador t_P es más deseable (Murthy,

1964). Para una u otra posibilidad, t_{RP} es mejor que ambos estimadores con una adecuada elección del parámetro k (según el criterio del error cuadrático medio mínimo uniformemente aproximado). De este modo queda garantizada la robustez que no poseían individualmente los estimadores de razón y producto, frente a posibles cambios en el signo del coeficiente de correlación entre las variables de interés y auxiliar muy correlacionadas.

Conviene añadir que el estimador t_{RP} puede tener una precisión similar a la media muestral \bar{y} , cuando $\rho \doteq 0$, pues sustituyendo el valor de k' dado en (8), en la fórmula (7), si $S_{xy} \doteq 0$ (y por tanto $k' \doteq \frac{1}{2}$) entonces $ECM(t_{RP}) \doteq V(\bar{y})$, aun en el caso en que las variables x e y sean aproximadamente incorrelacionadas, que es el caso más desfavorable para usar una variable auxiliar en la estimación de una función paramétrica que depende exclusivamente de la variable de interés y , como en nuestro caso es la media poblacional \bar{Y} .

References

- [1] Cochran, W.G.: Sampling Techniques (3 ed.). Wiley Pub. New York (1977).
- [2] Grosbras, J.M.: Methodes Statistiques des Sondages. Economica. París (1987).
- [3] Murthy, M.N.(1964): *Product method of estimation*. Sankhya Ser., A 26, 69-74.
- [4] Olkin, I. (1958): *Multivariate ratio method of estimation for finite populations*. Biometrika, 45, 154-165.
- [5] Rao, P.S.R.S. (1988): *Ratio and regression estimators*, in: Sampling. Eds. P.R. Krishnaiah and C.R. Rao, 449-468. Amsterdam. North-Holland.
- [6] Ruiz, M. (1988): *Un ensayo sobre criterios de inferencia en poblaciones finitas*. Qüestiió. , 323-332.

A review of the equilibrium concept

M. Ruiz Espejo

Facultad de Ciencias Económicas. UNED, Apartado 19207,

28080 Madrid, Spain.

S. Nadarajah

School of Mathematical Sciences. University of Nottingham.

University Park, Nottingham NG7 2RD, United Kingdom.

Abstract

The concept of equilibrium for random variables is reviewed as developed in Ruiz Espejo (1990, 1992a, 1992b, 1993, 1995, 1997). In particular, its role in the estimation of population mean and population variance, and two of its characterisations, one algebraic and other geometric, are described.

1. Introduction

The concept of equilibrium for a random variable was introduced by Ruiz Espejo (1990, p. 56) in the following terms:

Definition 1. Let X be a random variable with $E(X) = \mu$. For given $p \in [0, 1)$ we say that $(x, y) \in \mathbf{R}^2$ is equilibrated of order p for X if and only if

$$Pr(x < X < y) = 1 - p, \quad (1) \quad E[X(x, y)] = \mu, \quad (2)$$

where $X(x, y)$ denotes the random variable X truncated to the interval (x, y) . We shall refer to equations (1)-(2) as the system of equilibrium equations of order p for X .

For the following special class of random variables, we can establish interesting results on existence and uniqueness of (x, y) that are equilibrated of order p . Throughout the paper we give no proofs of results which can be found in the respective article(s).

2. Usual random variables

Definition 2. Let X be a continuous random variable on the interval (a, b) with distribution function F . We say that X is a usual random variable if and only if F is differentiable in (a, b) with $f(z) = dF(z)/dz > 0$ for $z \in (a, b)$.

Theorem 1. Let X be a usual random variable on (a, b) with $E(X) = \mu$. For every $p \in [0, 1)$ there exists a unique pair (x, y) that is equilibrated of order p for X .

Theorem 2. The system of equilibrium equations (1)-(2) has linearly invariant solutions, i.e. if (x_1, x_2) is equilibrated of order p for X and (y_1, y_2) is equilibrated of order p for $Y = AX + B$, $A > 0$, then $y_i = Ax_i + B$, $i = 1, 2$.

This means that the equilibrated pair associated with population X is also valid for all location-scale transformations of the population. One consequence of this is that estimates of the population mean μ derived from (1)-(2) are linearly invariant; Ruiz Espejo (1990, p. 63) derives a modification of the usual sample mean that satisfies this property. Applications to robust estimation, according Andrews *et al.* (1972) are also shown.

In the rest of this paper we shall consider only the usual random variables.

3. Optimality criteria

We discuss optimality of the solution (1)-(2) for usual random variables. We use two criteria: the minimal mean absolute error criterion and the minimal mean square error criterion.

3.1 Minimal mean absolute error criterion (Ruiz Espejo, 1992a)

Definition 3. Let F be a distribution function. Let $A, B \in \mathcal{B}$ be Borel sets with \mathcal{B} denoting the Borel σ -algebra. We say that $A = B$ a.e. with respect to F if and only if

$$\int_{A \Delta B} dF(s) = 0,$$

where $A \Delta B = (A \cup B) - (A \cap B)$ is the symmetric difference of A and B .

Theorem 3. Let X be a usual random variable with distribution function F , $E(X) = \mu$ and let

$$\mathcal{F} = \left\{ A \in \mathcal{B} : \int_A dF(s) = 1 - p \quad \text{and} \quad \int_A s dF(s) = (1 - p)\mu \right\}$$

be a family of Borel sets, $p \in [0, 1)$. Then (x, y) , the solution of (1)-(2), is an element of \mathcal{F} and it satisfies

$$\int_x^y |s - \mu| dF(s) \leq \int_A |s - \mu| dF(s)$$

for all $A \in \mathcal{F}$ with equality holding if and only if $(x, y) = A$ a.e. with respect to F .

Hence we say that the (x, y) solution of equilibrium equations of order p is optimal among all Borel sets with the same relative weight $1 - p$ in the sense of minimal mean absolute error.

3.2 Minimal mean square error criterion (Ruiz Espejo, 1992a)

Consider the system of equations

$$\int_x^y f(s)ds = 1 - p, \quad x + y = 2\mu. \quad (3)$$

We say that (x, y) is optimal in the sense of optimal mean squared error if it is the solution of (3). The solution (x, y) is optimal in the sense of both minimal mean absolute error and minimal mean squared error if f is symmetric.

The solutions of (x, y) based on both Theorem 3 and equation (3) are linearly invariant. Hence subsequent estimates of, say, the mean of the population X , are both optimal (in the sense of minimal mean absolute error or minimal mean square error criterion) and linearly invariant.

4. Extension of invariance

In Theorem 2 we showed that the equilibrium equations for usual random variables have linearly invariant solutions. Here we seek conditions for invariance under a wider class of transformations (Ruiz Espejo, 1995).

Theorem 4. Let $y = \phi(x)$, $x \in (a, b)$ be a strictly monotone and differentiable (with non-zero derivative) transformation. For a usual random variable X , the solution of the system of equilibrium equations (1)-(2) is invariant under Φ if and only if

$$\Phi\{E(X)\} = E\{\Phi(X)\}.$$

Corollary 1. In Theorem 4: (a) $\mu = E(X)$ is an inflexion point of Φ ; (b) If $\Phi(x) = Ax + B$, $A \neq 0$ then $E\{\Phi(X)\} = \Phi\{E(X)\}$; (c) If $\Phi(x) = Ax + B$, $A > 0$, we have Theorem 2.

Ruiz Espejo (1995) gives a construction where $\Phi\{E(X)\} = E\{\Phi(X)\}$ holds for a non-linear transformation Φ and usual random variable X . In brief he shows that $\Phi\{E(X)\} = E\{\Phi(X)\} = 0$, when $\Phi = \arctan x$ and $E(X) = 0$ with a bounded symmetric density f .

Non-linear invariance may be a desirable property under special circumstances, but the following theorem shows that its applicability could be limited.

Theorem 5. Let X be a usual random variable and suppose that $\mu = E(X)$ is unknown. If $\Phi(\mu) = E\{\Phi(X)\}$ for $\mu \in (a, b)$, then μ is an inflexion point of Φ and, for all $x \in (a, b)$, $\Phi(x) = Ax + B$, $A \neq 0$.

5. Equilibrated stratification

Ruiz Espejo et al. (1992b) introduce the concept of *equilibrated stratification* for estimation of population variance.

Definition 4. Let (x_h, z_h) , $h = 1, 2, \dots, L-1$ be the pair of real values equilibrated of order p_h for the population X where $0 < p_1 < \dots < p_{L-1} < 1$. For $h = 1, 2, \dots, L-1$ we define "equilibrated stratum h " to be the set $(x_{h-1}, x_h) \cup (z_h, z_{h-1})$, which is a union of two disjoint intervals, and "equilibrated stratum L " is defined to be the set (x_{L-1}, z_{L-1}) . So we have the population values classified into L strata.

Under equilibrated stratification the unbiased estimator for the population variance is

$$\sigma_{st}^2 = \sum_{h=1}^L W_h S_h^2$$

where W_h is the relative weight of stratum h and S_h^2 is the sample variance for stratum h . Under optimal allocation the sample size of stratum h is

$$n_h = \frac{n W_h \sqrt{\tau_{h,4} - \sigma_h^4}}{\sum_{k=1}^L W_k \sqrt{\tau_{k,4} - \sigma_k^4}}$$

where $\tau_{h,4}$ and σ_h^2 are respectively the fourth and the second central moments for stratum h and $n = n_1 + n_2 + \dots + n_L$.

Let S^2 , τ_4 and σ be the analogues of S_h^2 , $\tau_{h,4}$ and σ_h for simple random sampling (srs) of size n . We have the following theorem.

Theorem 6. Consider a equilibrated stratification with optimum allocation. Take n sufficiently large that

$$V_{opt}(\sigma_{st}^2) \approx \frac{1}{n} \sum_{h=1}^L W_h \sqrt{\tau_{h,4} - \sigma_h^4} \quad V_{srs}(S^2) \approx \frac{1}{n} (\tau_4 - \sigma^4).$$

Then we have $V_{opt}(\sigma_{st}^2) \leq V_{srs}(S^2)$.

Hence the precision of the unbiased estimator σ_{st}^2 , for sufficiently large sample size is at least as small as that of the classical minimum variance unbiased estimator for distribution-free setting. For further details including a discussion on *optimality of equilibrated stratification* see Ruiz Espejo et al. (1992b).

6. Two characterisations

We provide two characterisations: the first one characterises equilibrium for usual random variables in terms of a system of non-linear differential equations. This algebraic characterisation allows one to compute the equilibrated pair (x, y) by application of numerical analysis techniques as Henrici (1964) indicates (see Ruiz Espejo (1995) for a discussion of this); the second characterisation provides a visual interpretation of usual random variables by means of a three-dimensional curve with certain properties. It is a geometric characterisation of usual random variables.

6.1 Algebraic characterisation (Ruiz Espejo, 1995)

Theorem 7. Let X be a usual random variable with $E(X) = \mu$. Considering p as an independent variable on $[0,1]$, define the bivariate function $p \rightarrow (x(p), y(p)) = (x, y)$ is the equilibrated pair of order p for X . Then $x(p)$ and $y(p)$ are differentiable (with respect to p) and satisfy

$$\frac{dx(p)}{dp} = \frac{y(p) - \mu}{\{y(p) - x(p)\}f\{x(p)\}} \quad (4) \quad \frac{dy(p)}{dp} = \frac{x(p) - \mu}{\{y(p) - x(p)\}f\{y(p)\}} \quad (5)$$

with $x(p) < \mu < y(p)$ for all $p \in (0,1)$, $x(0) = a$, $y(0) = b$ and $\lim_{p \rightarrow 1} x(p) = \lim_{p \rightarrow 1} y(p) = \mu$.

Corollary 2. In Theorem 7, by setting $x(1) = y(1) = \mu$, we can make both $x(p)$ and $y(p)$ continuous on $[0,1]$. and by taking $p \rightarrow 1$, we have $x'(1) = -y'(1) = 1/[2f(\mu)]$.

Theorem 8. The solutions for (x, y) under the two systems (1)-(2) and (4)-(5), are equivalent.

6.2 Geometric characterisation (Ruiz Espejo, 1997)

Definition 5. A "equilibrium curve" is the curve $\{(p, x(p), y(p)) : p \in (0,1)\}$, in \mathbf{R}^3 with $x'(p) > 0$, $y'(p) < 0$ for all $p \in (0,1)$, $x'(1) = -y'(1) = 1/[2f(\mu)]$ and $a = x(0) < x(1) = \mu = y(1) < y(0) = b$.

Theorem 9. Given a equilibrium curve, the continuous positive function f determined by the equations

$$1 - p = \int_{x(p)}^{y(p)} f(s) ds \quad (1-p)\mu = \int_{x(p)}^{y(p)} sf(s) ds$$

is the density function of a unique usual random variable X on (a, b) with $E(X) = \mu$ (except in cases where the expectation is not finite).

Corollary 3. A usual random variable can be defined by a equilibrium curve and conversely a curve that satisfies the conditions in Definition 5 determines a usual random variable.

For further equivalent conditions involving equilibrium curves see Ruiz Espejo (1997).

References

- [1] Andrews, D.F., Bikel, P.J., Hampel, F.R., Huber, P.J., Rogers, W.H. and Tuckey, J.W.: Robust Estimates of Location. Princeton University Press. Princeton (1972).
- [2] Henrici, P.: Elements of Numerical Analysis. John Wiley. New York (1964).
- [3] Ruiz Espejo, M. (1990): A class of robust and linear invariant estimators of population mean. *Metron*, 48, 55-66.

- [4] Ruiz Espejo, M. (1992a): *Optimal Borel sets according to classical criteria*. Estadística, 44, 171-182.
- [5] Ruiz Espejo, M. (1993): *A system of differential equations characterising the equilibrium for usual random variables*. Rev. de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de España, 87, 307-318.
- [6] Ruiz Espejo, M. (1995): *An extension of the invariance of solutions in equilibrium equations*. Estadística Española, , 461-470.
- [7] Ruiz Espejo, M. (1997): *A geometric interpretation of the equilibrium for usual random variables*. Rev. de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de España, 91, 13-16.
- [8] Ruiz Espejo, M. and Ruiz Espejo, M.M. (1992b): *Equilibrated strategy for population variance estimation*. Test, 1, 79-91.

Una Revisión en dos métodos eficientes Bootstrap

Juan J. Prieto Martínez

Dpto. de Estadística e Investigación Operativa

Facultad de Ciencias Matemáticas. Universidad Complutense.

Resumen

El bootstrap es un método de remuestreo en estadística que tiene una amplia gama de aplicaciones, especialmente en situaciones en que el tamaño muestral es pequeño y no se pueden emplear, con confianza, resultados asintóticos. Destaca también su gran simplicidad conceptual y la sencillez de programación en ordenadores. El tiempo de computación es elevado, especialmente en métodos de tipo bootstrap iterado que, con el fin de reducir sesgos, emplean varios niveles de muestreo. En este trabajo se revisan dos métodos eficientes bootstrap (método centrado y de aproximación lineal), donde se indica como tomar una muestra aleatoria bootstrap por simulación para realizar el menor número de cálculos posibles, sin perder precisión. En general, se trata de reducir el tamaño muestral, a cambio de modificar el esquema de muestreo de forma que los estimadores sean tan fiables como si el tamaño muestral bootstrap fuera mayor.

1. Método de los desarrollos lineales

La idea es hacer un desarrollo de Taylor de un funcional cuya esperanza se desea estimar. Para dar una idea del método, supongamos que estamos estimando el sesgo, es decir, $U = \hat{\theta} - \theta$ y que el estimador del parámetro θ es $\hat{\theta} = g(\bar{X})$, que es una función que depende de la media de las variables p -dimensionales X_i . Será $U^* = \hat{\theta}^* - \theta = g(\bar{X}^*) - g(\bar{X})$, siendo \bar{X}^* la media de las remuestras. Con objeto de abreviar la formulación, en ocasiones utilizaremos las notaciones $\Delta \bar{X} = (\bar{X}^* - \bar{X})$ y $\Delta \bar{X}_\alpha = (\bar{X}_\alpha^* - \bar{X})$. Podremos pues realizar un desarrollo en serie de Taylor de esta expresión y quedará:

$$U^* = \sum_{j=1}^p \Delta \bar{X}^{(j)} g_j(\bar{X}) + \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p \Delta \bar{X}^{(j)} \Delta \bar{X}^{(k)} g_{jk}(\bar{X}) + \dots \quad (1)$$

donde el superíndice (j) indica el j -ésimo elemento del vector p -dimensional al que se aplica $g_j(x) = dg(x)/dx^{(j)}$ y $g_{j_1 \dots j_r}(x) = d^r g(x)/dx(j_1) \dots dx(j_r)$.

Además

$$\text{Var}(U^*/X) = \text{Var} \left\{ \sum_{j=1}^p \Delta \bar{X}^{(j)} g_j(\bar{X})/X \right\} + O(n^{-2}) = n^{-1} \hat{\sigma}^2 + O(n^{-2}), \quad (2)$$

donde

$$\hat{\sigma}^2 = n^{-1} \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{j=1}^p (X_i - \bar{X})^{(j)} g_j(\bar{X}) \right\}^2 \rightarrow \sigma^2 = \left\{ \sum_{j=1}^p (X_i - \mu)^{(j)} g_j(\mu) \right\}^2.$$

cuando $n \rightarrow \infty$, siendo $\mu = E(X)$ la media poblacional. Hemos visto en (2) que la varianza de U^* está determinada, asintóticamente, por la varianza del primer término de la derecha de (1). Por otra parte, se tiene

$$E \left\{ \sum_{j=1}^p \Delta \bar{X}^{(j)} g_j(\bar{X}) / X \right\} = \sum_{j=1}^p \{ E(\Delta \bar{X}^{(j)} / X) \} g_j(\bar{X}) = 0. \quad (3)$$

de manera que la componente lineal del desarrollo (1) no influye en $E(U^*/X)$, puesto que tiene esperanza nula. De acuerdo con (3), la idea central del método de remuestreo por desarrollos lineales consiste en quitar la parte lineal de (1), pasándola al término del lado izquierdo, remuestreando de la expresión así resultante. Al hacer esto, la varianza de la expresión que remuestreamos tiene un orden de magnitud $B^{-1}n^{-2}$, con lo que habremos mejorado en un orden de magnitud. En concreto, se define el funcional V en la forma

$$V^* = U^* - \sum_{j=1}^p \Delta \bar{X}^{(j)} g_j(\bar{X}). \quad (4)$$

Lo que haremos será remuestrear de V^* , utilizando remuestreo uniforme, en vez de hacerlo de U^* . Con esto, la aproximación bootstrap que se define para V^* seguirá siendo insesgada, de manera que no se elimina la parte de la varianza de U^* asociada al término lineal que se resta en (4). La aproximación bootstrap a V^* , será

$$\hat{v}_B^* = B^{-1} \sum_{b=1}^B V_b^*, \quad (5)$$

donde

$$V_b^* = U_b^* - \sum_{j=1}^p \Delta \bar{X}_b^{(j)} g_j(\bar{X}) = g(\bar{X}_b^*) - g(\bar{X}) - \sum_{j=1}^p \Delta \bar{X}_b^{(j)} g_j(\bar{X}). \quad (6)$$

para $b = 1, \dots, B$, siendo \bar{X}_b^* la media de la remuestra X_b^2 , remuestra idéntica a la que emplearíamos por remuestreo uniforme. Es decir, remuestreamos como siempre de U^* , calculando por (6) las remuestras de V^* . La expresión (5) nos da la aproximación bootstrap por remuestreo de aproximación lineal a $\hat{\mu}$ y converge a dicho valor con probabilidad 1, condicionada a X cuando $B \rightarrow \infty$. Se sabe por (3) que:

$$E(V^*/X) = E(U^*/X) = \hat{\mu},$$

es decir que \hat{v}_B^* es aproximadamente insesgada de μ . Por otra parte, tendremos:

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{v}_B^*/X) &= B^{-1} \text{Var}(V^*/X) = B^{-1} \text{Var} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p \Delta \bar{X}^{(j)} \Delta \bar{X}^{(k)} g_{jk}(\bar{X}) / X \right\} + O(n^{-3}) \\ &= B^{-1} n^{-2} \hat{\beta} + O(n^{-3}), \end{aligned} \quad (7)$$

donde $\hat{\beta}$ es una expresión que no depende de B ni de n y comprobando así que se ha reducido en un orden de n la varianza del remuestreo. Es importante señalar que métodos de este tipo se han aplicado en Oldford (1985) y Davidson *et al* (1986).

2. Método Centrado

Este método es original de Efron (1990). Recordemos que el método de aproximación lineal nos daba las aproximaciones (5) y (6):

$$\hat{v}_B^* = B^{-1} \sum_{b=1}^B V_b^* = B^{-1} \sum_{b=1}^B \left\{ g(\bar{X}_b^*) - g(\bar{X}) - \sum_{j=1}^p \Delta \bar{X}_b^{(j)} g_j(\bar{X}) \right\} = \hat{u}_B^* - \sum_{j=1}^p \Delta \bar{X}_b^{(j)} g_j(\bar{X}), \quad (8)$$

siendo \hat{n}_B^* la aproximación de remuestreo uniforme a \hat{u} y

$$\bar{X}^* = B^{-1} \sum_{b=1}^B \bar{X}_b \quad (9)$$

la media de las B remuestras. Desarrollando por Taylor $g(x)$, se tiene:

$$\sum_{j=1}^p \Delta \bar{X}^{(j)} g_j(\bar{X}) \cong g(\bar{X}^*) - g(\bar{X}). \quad (10)$$

Ahora, por (8) y (10), se tiene

$$\begin{aligned} \hat{V}_B &\cong \hat{u}_B^* - g(\bar{X}^*) - g(\bar{X}) = B^{-1} \sum_{b=1}^B g(\bar{X}_b^*) - g(\bar{X}) [g(\bar{X}^*) - g(\bar{X})] \\ &= B^{-1} \sum_{b=1}^B g(\bar{X}_b^*) - g(\bar{X}^*) = \hat{x}_B^*, \end{aligned} \quad (11)$$

siendo esta expresión la aproximación a \hat{u} por el método centrado. En (11) se ha empleado la definición de \hat{u}_B^* . Debe notarse que \hat{u}_B^* puede escribirse también como:

$$\hat{u}_B^* = B^{-1} \sum_{b=1}^B g(\bar{X}_b^*) - g(\bar{X}^*), \quad (12)$$

con lo cual, según (11) y (12), queda claro que la diferencia entre el método de aproximación lineal y de centrado consiste en que, este último, $g(\bar{X}_B^*)$ tiene su media centrada en torno a $g(\bar{X}^*)$ en lugar de en torno a $g(\bar{X})$ como en el método de aproximación lineal.

En los casos que hemos desarrollado sobre ambos métodos, consistentes en la estimación de un sesgo, está demostrado (Hall, 1989) que los dos métodos son asintóticamente equivalentes. Cabe pues esperar que en la estimación de un sesgo para n y B grandes, los experimentos de simulación proporcionen resultados parecidos.

Notemos que se trabaja con un funcional de la media de las remuestras, tratando de obligar a que, al realizar el muestreo bootstrap, coincidan la media de las remuestras y la media de la muestra original, es decir, $\bar{X}^* = \bar{X}$. La forma de conseguir esto en la práctica consiste en obtener las B remuestras de forma que, en su unión, cada X_i aparezca exactamente B veces.

En el caso $\hat{u} = E[g(\bar{X})/X]$, se tiene

$$\hat{u}_B = B^{-1} \sum_{b=1}^B g(\bar{X}_b)$$

y se cumple que $\hat{u}_B \rightarrow \hat{u}$ cuando $B \rightarrow \infty$ (con probabilidad 1 condicionada a X).

Además,

$$\widehat{\text{Var}}(\hat{u}_B/X) = B^{-1}n^{-2}\hat{\beta} + 0(B^{-2}n^{-2} + B^{-3}n^{-3})\text{Var}(X_B^*/X)$$

y

$$E(\hat{u}_B/X) - u = -B^{-1}n^{-1}\alpha + 0(B^{-1}n^{-2}) = E(X_B^*/X).$$

Es necesario subrayar que esta última técnica se puede aplicar a problemas de estimación bootstrap cualesquiera, mientras que con los métodos de aproximación lineal y centrado no es fácil, ya que es necesario adaptarlos a cada problema particular, realizando muchos cálculos teóricos.

3. Referencias

- Davison, A.C., Hinkley, D.V. y Schechtman, E. (1986): *Efficient Bootstrap Simulation*. Biometrika, **3**, 417-431.
- Efron, B. (1990): *More efficient Bootstrap Computations*. Journal of the American Statistical Association, **85**, 79-89.
- Hall, P. (1989): *On Efficient Bootstrap Simulation*. Biometrika, **76**, 613-617.
- Oldford, R.W. (1985): *Bootsatrapping by Monte-Carlo versus approximating the estimator and bootstrapping exactly: Cost and performance*. Comm. Statis. Ser B, **14**, 395-424.

Stochastic model of growth with an explicit mesoscopic length

M. Vázquez-Prada and A. F. Pacheco.

Departamento de Física Teórica.

Universidad de Zaragoza, 50009 Zaragoza, Spain.

Abstract

A simple stochastic model inspired by the spatial spreading of a plant community is presented. Each number of the group is able to generate new individuals around it within a given finite distance. As the local density of individuals is considered constant, only those individuals near the border are able to actually produce a growth of the group and therefore to modify the form of the boundaries. The bulk size is studied as a function of time. Likewise the self-affine fractal properties of the external border are analysed and the critical exponents calculated.

1. Introduction

In past decades, due to its importance in many natural and technological fields, the investigation of the properties of rough surfaces or interfaces has drawn much attention and considerable progress has been made in its understanding (see Ref. [1] and references therein). Despite the diversity of phenomena leading to rough surfaces or interfaces, these can usually be described in terms of the simple concepts of fractal geometry and most of them appear to exhibit self-affine scaling over a wide range of length scales [2], [3]. In this paper where we study a stochastic model which is inspired by the spatial spreading of a plant community, an interesting rough border will emerge, which will also be characterized in terms of fractal geometry.

Here the plant community, trees to be specific, is represented as a compact set of occupied sites on a regular two-dimensional lattice. That is, we assume that the spatial density in the population is constant. In order to describe the growth process, the event in which one of the trees produces seeds, which are dispersed around the parent-tree in a circle of a maximum radius l_0 , will be referred to as a "shot". Expressed in units of the elementary lattice length, this maximum radius, l_0 , is an integer. Thus, l_0 plays the role of a mesoscopic length scale. In each specific shot, the actual radius of seed-dispersion l , is chosen at random among any integer from 1 to l_0 . Shots occur one at a time (this

assumption can be modified), and each member of the population has equal probability of shooting. Whenever a shot is such that a part of the sites reached are beyond the border of the population, this implies the growth of the cluster by the addition of the newly touched sites and, in consequence, the borderline of the population is modified. Seeds falling onto already occupied sites are wasted. As in other schemes devised to simulate various phenomena, we can start by nucleating around a single individual or by filling a strip geometry [4]. In the analysis of the surface properties, we will choose this second option because it is more convenient to draw the critical exponents of the model and hence to find out the universality class to which it belongs.

In Section 2., we will give some technical details of the model and will analyse the dependence of the bulk size of the systems with time. In Section 3., we will concentrate on the study of the surface properties, and the critical exponents will be calculated. Finally, in Section 4. we state our conclusions.

2. The model

As stated in Section 1., any tree belonging to the community can be a source of growth. The algorithm to follow is expressed in four rules:

1. One chooses, with equal probability one point (tree) belonging to the already formed group (community).
2. One chooses, with equal probability, a length l , $1 \leq l \leq l_0$. Thus l_0 is a prescribed length which will be called the maximum shooting length. In terms of the basic lattice unit (or microscopic scale), l and l_0 are integer numbers.
3. One draws a circle of radius l around the point chosen in step (1).
4. In the case that the circle formed in (3) has points lying outside the already existing cluster, these points are added to the cluster, leading to an increase of the volume and a modification of the border. Thus, a growth pulse occurs. If the location of the point chosen in (1) and the l chosen in (2) are such that all the points in the circle belong to the pre-existing group, then in this shot there is no increase in the volume of the community, and the border is not modified.

Let us analyse the bulk properties of a cluster.

The total mean-volume reached by a community (number of points of the lattice belonging to the cluster, N) is easily related to the total number of shots n . Let us start with the growth nucleated around a point. For maximum simplicity, we consider first the rate of

growth of a straight segment of length l_i , if any point of it, chosen at random, can shoot rightwards at a maximum distance l_o . The mean length incorporated to l_i after 1 shot is:

$$\Delta = \int_0^{l_i} \frac{dx}{l_i} \int_0^{l_o} \frac{dy}{l_o} \cdot (y + x - l_i) \cdot \Theta(y + x - l_i) \quad (1)$$

See Fig. 1a.

The x coordinate runs along the existing length, l_i , (source of shots); the y coordinate

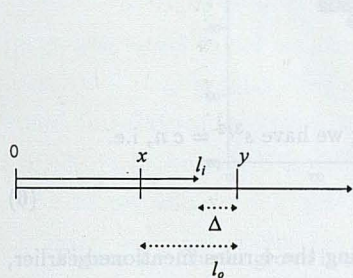


Fig. 1a.

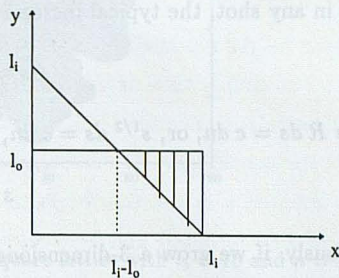


Fig. 1b.

runs along the possible shooting length, l_o , and $(y + x - l_i)$ represents the length added by a successful shot. The Heaviside step function assures that this is something positive. Thus one has to compute the shaded area of Fig. 1b which is

$$\Delta = \frac{1}{6} \frac{l_o^2}{l_i} \quad (2)$$

Thus in the shot n , the segment grows according to

$$l_n - l_{n-1} = \frac{l_o^2}{6} \frac{1}{l_{n-1}} \quad (3)$$

At the asymptotic limit of $n \rightarrow \infty$, Eq. 3 can be cast in the differential form

$$dl = \frac{l_o^2}{6} \frac{dn}{l} \quad (4)$$

and after integrating, we obtain

$$\frac{l^2}{2} = \frac{l_o^2}{6} n + c$$

, (henceforth, c will always represent a constant), i. e.

$$l \xrightarrow{n \rightarrow \infty} c(n)^{1/2} \quad (5)$$

This result can be understood intuitively. The probability of choosing a point on l which can actually be a source of growth is $\approx l_o/l$; and as in these cases the average increase is of the order of l_o , hence

$$\Delta l \approx \frac{l_o}{l} \cdot l_o = \frac{c}{l}$$

which leads to the behaviour expressed in Eq. 5; $l \propto n^{1/2}$. Using this qualitative argument we obtain similar expressions for the growth of clusters in 2 or 3 dimensional systems. In 2 dimensions, having a cluster of radius R , the probability of choosing a point apt to make successful shots is of the order of

$$\frac{4\pi R^2 - 4\pi(R - l_o)^2}{4\pi R^2} \xrightarrow{R \gg l_o} \frac{l_o}{R}$$

Hence, in any shot, the typical increase of area will be

$$\Delta s \approx \frac{l_o}{R} 4\pi l_o^2 \propto \frac{c}{R}$$

That is $R ds = c dn$, or, $s^{1/2} ds = c dn$, and integrating we have $s^{3/2} = c n$, i.e.

$$s \xrightarrow{n \rightarrow \infty} c n^{2/3} \quad (6)$$

Analogously, if we grow a 3-dimensional cluster following the 4 rules mentioned earlier, we find that the probability of choosing a good shooting emplacement is c/R , R being the mean radius of the already existing cluster ($R \gg l_o$). The average growth produced by 1 shot is again a constant and hence the integration, for large values of n , leads to

$$v \xrightarrow{n \rightarrow \infty} c n^{3/4} \quad (7)$$

Finally, if the growth proceeds by filling a 2-dimensional strip which has already attained a mean height h ($h \gg l_o$), departing from a segment of fixed length L , the probability of choosing a useful shooting site is $\approx c/h$. The increase of surface produced in a shot is again $\approx c/h$, so that $ds = c h dn$, $s ds = c L dn$, $s^2 = c L n$, i.e.

$$\frac{s}{L^{1/2}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} c n^{1/2} \quad (8)$$

The asymptotic relations (5), (6), (7) and (8) are easily checked by numerical simulations.

3. Surface Properties

The behaviours obtained in Section 2. refer to the bulk properties of the clusters, whose fractal dimension is the Euclidean dimension of the underlying lattice. In Fig. 2, we show an example of a cluster grown in a 2-dimensional square lattice, $l_o = 10$ and $n = 10^5$. Here, one can appreciate the roughness of the border, which behaves as a self-affine fractal. To study the peripheric properties of the clusters, we will choose a strip of length L , and mean height h .

To obtain the exponents of the surface, one has to go to simulations of very big clusters, i.e. very high values of L and h . In addition, this model is seen as highly fluctuating which

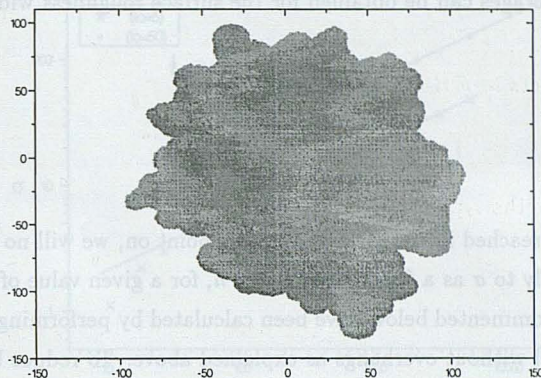


Figure 2.—Cluster grown in a 2-dimensional square lattice with $l_o = 10$ and $n = 10^5$

implies that obtaining safe means requires the averaging over large numbers of simulations. Applying the above mentioned four rules, in general, overhangs appear on the growing surface profiles. This fact, which breaks the one to one correspondence between the i ($1 \leq i \leq L$) discrete coordinate on the basis of the strip and its corresponding height z_i , induces a considerable complication in the handling of data, and hence considerable CPU time spent. This fact can also be appreciated in Fig. 2, where, sometimes, for a fixed polar angle, several values of r at the border will correspond. Thus the acquisition of good statistics, when overhangs are considered, is almost prohibitive because of the great deal of information one has to store and handle at any step of the calculation. Therefore, in practice, we will modify rule (4) in order to avoid the overhangs. This modification does not alter the conceptual core of the model but allows us to obtain reliable results much more easily. Focusing our attention on the growth of the surface only and in order to speed up the process of building the strip, one observes that the position of the site for a new shot (rule (1)) can be fixed by considering only the occupied points lying under the existing surface and above z_i (*minimum*) $- l_o$, because the points lying under this level have no chance of shooting and modifying the surface. Now we pass to the trick for avoiding overhangs. Having fixed the coordinates (i_o, z_o) for a new shot, and having fixed l , we consider only the upper half external border of the circle formed in that shot. The new shot can affect the surface, in principle, from $i_o - l$ to $i_o + l$; whenever one of these i coordinates has a z value lower than that of the corresponding one in the semicircle, it is updated and adopts the new higher value; if, on the contrary, the z value of one of the i coordinates affected is equal to or higher than that of the semicircle, its z value remains the same. Working with these new simple rules the model continues to be highly

fluctuating, but as the information one has to handle at each step is merely the set of L z_i values, excellent averages can be obtained for the surface roughness width. This is given by

$$\sigma = \left\{ \frac{\sum_{i=1}^L (z_i - h)^2}{L} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (9)$$

where

$$h = \frac{\sum_{i=1}^L z_i}{L} \quad (10)$$

is the mean height reached in the strip. From this point on, we will no longer refer to n (or time), but simply to σ as a function of L and h , for a given value of l_0 .

All the results commented below have been calculated by performing numerical simulations of the model without overhangs as explained above. To reduce boundary effects, we have imposed periodic conditions to the simulations. Fig. 3 is a log-log plot of σ vs h , for $l_0 = 5$ ($L = 1000$) and $l_0 = 50$ ($L = 5000$). We can observe the three stages of the curves: an initial transient, the zone of rectification (with slope ≈ 0.33) and finally the stage of saturation in which, for sufficiently high h , σ is a constant. These curves

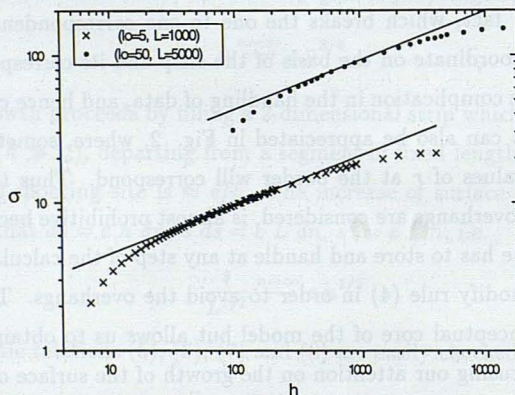


Figure 3.—Log-log plot of σ vs h . The dashed straight lines correspond to a slope of 0.33.

have been calculated with high precision: each point is the result of averaging one thousand simulations. The qualitative behaviour observed in this figure is the standard one expected in these models [5] and puts in evidence the so called growth exponent, β , which is near 0.33 independent of L and of l_0 .

Fig. 4 shows a log-log plot of σ vs L for sufficiently high h , in order for σ to have reached saturation [5]. Curves for $l_0 = 5$ and $l_0 = 50$ are drawn. Here there are only two behaviours: the initial one, for small L , and the asymptotic one in which the slope, α ,

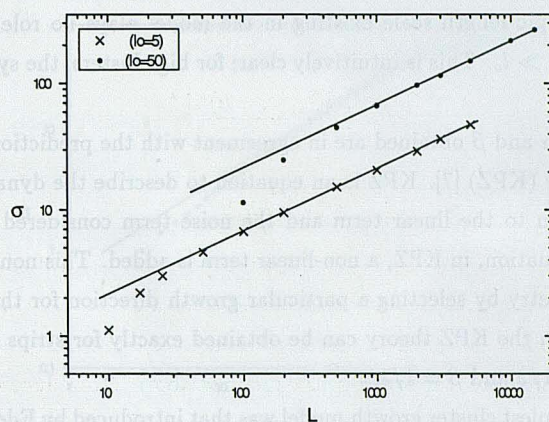


Figure 4.—Log-log plot of σ vs L . The dashed straight lines correspond to a slope of 0.5

is constant and has a value of 0.5 in good approximation. To obtain these results it is necessary to build up strips of very high h , and averaging σ only when one is certain that saturation has been reached: we have taken simulations with h from $10 \times L$ to $15 \times L$ and averaged at least the results of 10 strips for each point of the graph.

Note that with the method used to obtain the graphics of Fig. 4; i.e. to average σ values over many simulations with L and l_0 fixed, makes no sense to explore L values equal to or less than l_0 . In an extreme example of say $l_0 = 10$, $L = 2$, the result of a successful shot could induce, due to the periodic boundary conditions, the superposition of the new added points on to themselves in five successive sweeps. We avoid this pathology by considering $L > l_0$.

As is well known, however, the roughness exponent α can alternatively be obtained by the so called windows method [6]. One grows a strip of large length, L_0 , up to a very large h , in order to reach saturation for the full length of the strip. Then, one analyses and averages the behaviour of the border, looking at it at progressively longer window lengths, L . This method produces graphics identical to those of Fig. 4, and therefore $\alpha = 0.5$, but in this case it is possible to explore lengths $L < l_0$ without pathologies, because now the strip size, L_0 , is much bigger than l_0 .

4. Conclusions

We have presented a simple stochastic model of growth, with an explicit mesoscopic length, inspired by the way a plant community spreads. The bulk and the surface properties have been analysed. From the results of Fig. 3 and Fig. 4, we deduce that the values of the

exponents, $\alpha \approx 0.5$ and $\beta \approx 0.33$, are independent of the value chosen for l_0 . In other words, the mesoscopic length scale existing in the model plays no role when one deals with big strips, $L, h \gg l_0$. This is intuitively clear; for big clusters, the system forgets the mesoscopic details.

The exponents α and β obtained are in agreement with the prediction of the Kardar-Parisi-Zhang theory (KPZ) [7]. KPZ is an equation to describe the dynamics of growing surfaces; in addition to the linear term and the noise term considered in the Edward-Wilkinson linear equation, in KPZ, a non-linear term is added. This non linearity breaks the up-down symmetry by selecting a particular growth direction for the interface. The critical exponents in the KPZ theory can be obtained exactly for strips like ours. These exponents are $\alpha = 1/2$ and $\beta = 1/3$.

Perhaps the simplest cluster growth model was that introduced by Eden [8] to simulate the growth of tumors or bacterial colonies. When growing an Eden particle cluster, on a lattice, the only rule to follow is to choose at random one of the empty sites next to the cluster, and fill it with a particle. This is reiterated and the cluster grows by the successive addition of particles. Thus it is clear that our model converts into Eden's, assuming $l_0 = 1$ because in this case the only appropriate sites for shooting are those in the same border. In other words Eden's is a particular case of our model when $l_0 = 1$, i.e. when the mesoscopic length disappears. In fact Eden's model also belongs to the KPZ universality class [9].

Let us conclude by pointing out that there can be a problem when one analyses the experimental profile of a phenomenon in which there exists an underlying l_0 length and the samples analysed are too small. Suppose that such a profile has been digitized as in Fig. 5 and analysed by means of the windows method.

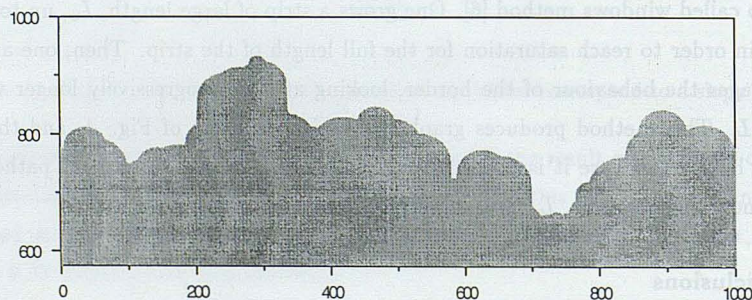


Figure 5.—Surface profile obtained with $l_0 = 50$, $L = 1000$ and $h = 800$.

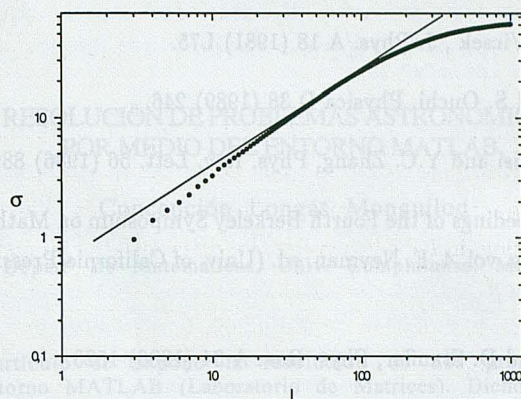


Figure 6.—Attempt to determine a scaling exponent from the profile shown in Fig. 5. The dashed straight line corresponds to a slope of 0.81 .

The result obtained is graphed in Fig. 6. From, say, $L = 30$ to $L = 100$ the figure looks straight and one would be tempted to draw a value of α equal to that slope ≈ 0.8 . In fact these data have been obtained with our model from a strip with $L_o = 1000$, and $l_o = 50$. All the way up to $L \simeq 100$ is saturated ($h = 800$), and the final plateau is due to the limited height of the strip compared to L_o . But this result overestimates α because this rectification is only a mirage. The study of strips with higher values of h would dissipate the plateau and would put in evidence that the true zone of scaling had not yet been reached . The existence of l_o provokes a crossover and is responsible for the great delay in the appearance of the real scaling.

Acknowledgements

M. V-P. thanks Miren Alvarez for discussions. This work was supported in part by a grant of the Spanish DGICYT.

References

- [1] A.L. Barabasi and H.E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge Univ. Press. Cambridge, 1995).
- [2] F. Family and T. Vicsek, eds. *Dynamics of Fractal Surfaces* (World Scientific, 1991) and references therein.
- [3] T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena* (World Scientific Singapore, 1989)

- [4] R. Jullien and R. Botet, J. Phys. A 18 (1985) 2279.
- [5] F. Family and T. Vicsek, J. Phys. A 18 (1981) L75.
- [6] M. Matsushita and S. Ouchi. Physica D 38 (1989) 246.
- [7] M. Kardar, G. Parisi and Y.C. Zhang, Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 889.
- [8] M. Eden, in: Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, vol. 4, F. Neyman, ed. (Univ. of California Press, Berkeley, 1961) p. 223.
- [9] J.G. Zabolitzky and D. Stauffer, Phys. Rev. A 34 (1986) 1523.

Acknowledgements

M. V-P. thanks Miquel Alvarez for discussions. This work was supported in part by a grant of the Spanish DGICT.

References

- [1] A.L. Barabási and H. Stanley, *Fractal and Fractal Growth Processes* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1995).
- [2] F. Family and T. Vicsek, *The Dynamics of Fractal Surfaces* (World Scientific, 1991).
- [3] T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena* (World Scientific, Singapore, 1992).

RESOLUCION DE PROBLEMAS ASTRONOMICOS POR MEDIO DEL ENTORNO MATLAB.

Concepción Longás Monguilod

Departº de Matematicas. Univ. Complutense. Madrid

Resumen

En este artículo se expone la resolución de dos problemas astronómicos utilizando el entorno MATLAB (Laboratorio de Matrices). Dichos problemas son los siguientes:

- (a) Cálculo de órbitas de estrellas dobles por el método de R. Cid.
- (b) Integración de la ecuación diferencial que aparece en la formulación regularizada y universal del movimiento kepleriano.

1.- Introducción

En consonancia con el gran avance de la informática en velocidad de cálculo, capacidad de almacenaje, utilidades disponibles, potencia de aplicación, etc. la empresa Math. Inc. ha creado el entorno MATHLAB, que en principio ha sido utilizado en problemas de Álgebra lineal, Teoría de Matrices y Análisis numérico y que nosotros aplicaremos a la resolución de problemas de Astronomía.

En la actualidad su campo de aplicaciones es muy diverso, pudiendo citar, entre otras, además de las citadas, las siguientes:

- a) Procesamiento de Señales Digitales
- b) Teoría de Control
- c) Señales y Sistemas

Como era de esperar, a lo largo del tiempo se han ido utilizando diferentes versiones de MATHLAB, que mejoraban las anteriores, si bien la última versión existente es la 5. 3.0, del año 1999.

MATLAB dispone de TOOLBOX, que son colecciones especializadas que sirven para trabajar en la actualidad en problemas de: 1. Sistemas de Control, 2. Análisis de Espectros de Alto Orden, 3. Procesamiento de Imágenes, 4. Optimización, 5. Splines, 6. Estadísticos e 7. Identificación de Sistemas.

Cada uno de ellos, escrito en código Matlab, está diseñado con Métodos Numéricos potentes y se pueden utilizar como plantillas cuando se crean nuevas funciones.

Entre sus posibilidades figura un apartado de Cálculo Simbólico, que es un conjunto de herramientas basadas en Maple V, para cálculo simbólico y aritmético, con precisión variable, que hemos utilizado en el diseño de nuestros programas.

2.- Método de R. Cid.

En el cálculo de órbitas de estrellas dobles son utilizadas las observaciones (ρ, θ) , de la órbita aparente, que representan *las distancias* y *los ángulos de posición* medidos en cada época t . Utilizando estas observaciones deben calcularse los elementos orbitales (a = semieje mayor, P = periodo, T = época de paso por el periastro, e = excentricidad, Ω = ángulo del nodo, ω = anomalía o ángulo medido desde el nodo al periastro e I = inclinación) de la órbita relativa.

Por tanto, son necesarias siete ecuaciones del tipo

$$\rho_i = \rho_i(a, P, T, e, \omega, \Omega, I, t_i) \quad \theta_i = \theta_i(a, P, T, e, \omega, \Omega, I, t_i)$$

para determinar los elementos orbitales.

En el método de R. Cid son utilizados tres lugares normales (ρ_i, θ_i, t_i) ($i = 2, 3, 4$) y una observación incompleta (θ_1, t_1) para la determinación de los elementos orbitales por medio de las ecuaciones de Thiele

$$n(t_k - t_1) - \frac{\Delta_{ik}}{K} = (E_k - E_1) - \text{sen}(E_k - E_1) \quad (1)$$

donde E representa una anomalía excéntrica, $n = 2\pi/P$ el movimiento medio, $K = a^2 \sqrt{1-e} \cos I$, y finalmente, $\Delta_{ik} = \rho_i \rho_k \text{sen}(\theta_k - \theta_i)$.

Aplicando la ecuación (1) a las épocas $(t_1 - t_2)$, $(t_1 - t_3)$, $(t_1 - t_4)$, $(t_2 - t_3)$, $(t_2 - t_4)$, $(t_3 - t_4)$, y eliminando las incógnitas n , K , ρ_1 , entre las ecuaciones resultantes, obtenemos un sistema de tres ecuaciones

$$\begin{aligned} F(V-U) - pF(V) + qF(U) &= 0 \\ hF(W-V) - kF(W-U) + F(W) &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

$$\Psi = \Phi(VU) - (1-N)\Phi(WU) + (1-Q)\Phi(WV) = 0$$

con las incógnitas $U = E_4 - E_3$, $V = E_4 - E_2$, $W = E_4 - E_1$, donde las funciones $F(X)$, $\Phi(XY)$, están definidas por las igualdades

$$F(X) = X - \text{sen } X, \quad \Phi(XY) = -\text{sen } X + \text{sen } Y + \text{sen}(X-Y)$$

y las cantidades N , Q , R , S , p , q , h , k , se calculan por las expresiones

$$N = \frac{\rho_2 \text{sen}(\theta_2 - \theta_1)}{\rho_4 \text{sen}(\theta_4 - \theta_1)}, \quad Q = \frac{\rho_3 \text{sen}(\theta_3 - \theta_1)}{\rho_4 \text{sen}(\theta_4 - \theta_1)}, \quad R = \frac{\rho_3 \text{sen}(\theta_3 - \theta_2)}{\rho_4 \text{sen}(\theta_4 - \theta_1)}, \quad S = \frac{\rho_2 \text{sen}(\theta_3 - \theta_2)}{\rho_4 \text{sen}(\theta_4 - \theta_3)},$$

$$p = \frac{Rt_{23} - RS_{24}}{Rt_{24} - St_{34}}, \quad q = \frac{Rt_{23} - RS_{24}}{Rt_{24} - St_{34}}, \quad h = \frac{t_{13} - Qt_{14}}{Qt_{12} - Nt_{13}}, \quad k = \frac{t_{12} - Nt_{14}}{Qt_{12} - Nt_{13}}$$

con $t_{ik} = t_i - t_k$.

La resolución del sistema (2) se efectúa dando valores a V y obteniendo los correspondientes de U por medio de la primera ecuación. Para cada par de valores (U, V) , la segunda ecuación proporciona dos valores de W , con los cuales se obtiene el valor correspondiente de Ψ en la tercera ecuación. Las soluciones del sistema se encuentran entre los posibles valores de V para los cuales Ψ cambia de signo.

Una vez obtenida la posible solución (U, V, W) , se pueden calcular los valores de N , Q , R , S , por ejemplo $N = \Delta_{12} / \Delta_{14}$. De esta forma, la anomalía media n resulta por cualquiera de las ecuaciones de Thiele, por ejemplo

$$n = [F(W-V) - NF(W)] / [t_{12} - Nt_{14}]$$

En general suele hacerse un promedio de los cálculos obtenidos para n por medio de las cantidades N , Q , R , S . Conocido el valor de n , obtenemos fácilmente el Periodo $P = 2\pi/n$

Asimismo, el valor de K puede ser calculado por la ecuación de Thiele para las combinaciones de tiempos 23, 24 y 34. Por ejemplo:

$$K = \Delta_{24} / [nt_{24} - F(V)]$$

Las igualdades

$$e \sin E_3 = \frac{R \sin(V-U) - RS \sin U}{RS + R - S}, \quad e \cos E_3 = \frac{RS \cos U + R \cos(V-U) - S}{RS + R - S}$$

sirven para calcular la excentricidad e y la anomalía excéntrica E_3 , así como las anomalías $E_1 = E_3 - (W-U)$, $E_2 = E_3 - (V-U)$, $E_4 = E_3 + U$.

En estas condiciones, la época de paso por el periastro T , viene determinada por la ecuación de Kepler $n(t-T) = E - e \sin E$ para cualquiera de los tiempos t_i ($i = 1,2,3,4$).

Para la determinación de los elementos Ω , ω , I , se pueden utilizar las constantes de Innes A , B , F , G , mediante las fórmulas

$$\operatorname{tg}(\omega + \Omega) = \frac{B-F}{A+G}, \quad \operatorname{tg}(\omega - \Omega) = -\frac{B+F}{A-G}, \quad \operatorname{tg}^2\left(\frac{I}{2}\right) = -\frac{(B+F)\sin(\omega+\Omega)}{(B-F)\sin(\omega-\Omega)}$$

Para ello, podemos determinar previamente las anomalías verdaderas f_i ($i = 1,2,3,4$) con ayuda de la ecuación

$$\operatorname{tg}(f_i/2) = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}} \operatorname{tg}(E_i/2)$$

y dichas constantes por medio de cuatro ecuaciones del tipo

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{B + G \operatorname{tg} f}{A + F \operatorname{tg} f}$$

3.- Aplicación del método al par ADS 8148.

De acuerdo con la lista de observaciones, hemos elegido para (t, θ, p) , los siguientes lugares normales

	t	θ	p
1	1842.29	87°0	
2	1897.30	56°6	2.52
3	1939.26	337°3	0.68
4	1979.77	148°1	1.20

que nos han permitido obtener los valores

$$\begin{array}{ll} N = -1.2138366225938 & p = -0.6596646314503 \\ Q = -0.6093907393617 & q = -2.3787346866380 \\ R = -0.5570047896713 & h = 2.14709277338732 \\ S = -12.9063769323435 & k = 2.635779864535 \end{array}$$

con ayuda de los cuales, para valores de 15 en 15 grados, comprobamos que existe una solución entre 211° y 226°, llevada más tarde, de grado en grado al intervalo (217° - 218°).

El cálculo de la solución del sistema fundamental, se ha realizado de forma directa por medio de las órdenes de Matlab

```
segundo 1 = (1-p) * U + p * sin(U)
syms U
f = (1-q) * U + q * sin(U) + sin(U-U) - segundos
U = solve(f,U)
u = numeric(U)
segundo 2 = N * sin(u) - Q * sin(U) + sin(U-U)
syms W
g = (N-Q) * sin(W) + (1-N) * sin(W-U) - (1-Q)*sin(W-U) - segundo 2
W = solve(g,W)
w = numeric(W)
```

obteniendo los valores

V	217°	218°
U	128°.1092830713732	128°.557352817650
W	291°.8054197767604	291°.358185902107

Finalmente, por interpolación lineal y resolución simbólica se han obtenido, respectivamente, los resultados siguientes:

V = 217°8943063925845	V = 217°8943063925845
U = 128°.509947097925	U = 128°.5100750822306
W = 291°.2997620562626	W = 291°.29983961066

con residuos finales para las tres ecuaciones fundamentales

$$H_1 = 0 \quad H_2 = 0.1488492337 \cdot 10^{-5} \quad H_3 = -1.7763 \cdot 10^{-15}$$

Los elementos orbitales que han resultado después de haber efectuado el cálculo simbólico, son los siguientes:

a = 1".926986176845	P = 182 ^a .84002831407
T = 1948.4753629338	e = 0.5348113049649
ω = 322°.78052864066	Ω = 233°.14810497555
I = 127°.48640234415	

Con estos elementos orbitales, hemos pasado al cálculo de diferencias observación-cálculo $\Delta\theta, \Delta\rho$, para las observaciones disponibles, dadas en el orden usual t, θ, ρ , que incluimos a continuación en la siguiente secuencia ($t, \theta, \rho, \Delta\theta, \Delta\rho$)

t	θ°	ρ''	$\Delta\theta^\circ$	$\Delta\rho''$
1827.82	97.2	2.30	-1.290	0.296
1829.37	94.0	1.89	-3.068	-0.155
1831.88	92.4	2.10	-2.480	-0.009
1833.51	91.1	2.24	-2.428	0.091
1835.85	90.5	2.41	-1.172	0.205
1841.06	88.1	2.41	0.252	0.088
1842.29	87.0	2.38	0.000	0.033
1844.05	85.2	2.47	-0.617	0.087
1847.20	82.3	2.46	-1.483	0.018
1850.60	81.2	2.47	-0.491	-0.031
1853.22	80.5	2.56	0.358	0.018
1854.53	79.4	2.54	0.014	-0.021
1857.00	76.9	2.51	-1.088	-0.084
1861.37	75.6	2.63	0.006	-0.013
1863.99	76.3	2.53	2.103	-0.137
1865.89	73.2	2.79	0.002	0.108
1867.50	74.5	2.69	2.140	-0.002
1872.60	71.0	2.59	1.262	-0.123
1875.64	68.2	2.73	0.013	0.013
1877.33	67.5	2.67	0.174	-0.046
1878.70	67.9	2.59	1.273	-0.046
1881.77	65.4	2.77	0.346	0.068
1883.82	64.2	2.74	0.206	0.050
1887.45	62.9	2.61	0.811	-0.051
1891.28	61.9	2.54	1.877	-0.077
1893.21	59.2	2.58	0.247	-0.010
1894.97	58.7	2.57	0.744	0.008
1899.30	56.6	2.52	0.000	0.000
1900.42	54.4	2.45	-0.305	-0.005
1902.84	54.0	2.39	0.840	-0.007
1905.81	54.1	2.19	2.950	-0.126
1907.74	49.3	2.29	-0.463	0.032
1909.50	48.1	2.25	-0.333	0.049
1911.86	45.8	2.12	-0.731	0.002
1913.67	43.7	2.05	-1.265	0.000
1914.24	46.0	2.06	1.551	0.033
1915.53	44.4	1.98	1.162	0.006
1916.91	42.0	2.05	0.134	0.135
1918.26	39.8	1.87	-0.638	0.015
1919.31	39.0	1.83	-0.259	0.025
1920.36	37.9	1.82	-0.113	0.065
1921.35	35.0	1.76	-1.770	0.055
1922.28	34.6	1.69	-0.933	0.032
1923.27	33.0	1.73	-1.135	0.125

1924.28	32.8	1.58	0.191	0.030
1925.29	30.5	1.52	-0.470	0.026
1926.41	29.4	1.45	0.400	0.020
1927.46	25.9	1.29	-1.082	-0.078
1929.97	20.7	1.22	-0.610	0.005
1931.26	17.7	1.10	-0.092	-0.034
1932.38	13.5	1.02	-0.801	-0.044
1933.24	11.6	1.03	0.311	0.021
1934.74	6.0	0.94	0.811	0.024
1936.37	355.5	0.81	-1.521	-0.010
1937.32	349.3	0.74	-2.048	-0.028
1938.36	343.2	0.67	-1.046	-0.048
1939.26	337.3	0.68	0.000	0.000
1940.33	330.5	0.64	2.395	-0.005
1941.23	318.2	0.60	-1.508	-0.026
1942.35	305.7	0.62	-3.051	0.004
1943.26	298.8	0.60	-0.985	-0.021
1944.97	284.0	0.62	0.165	-0.035
1946.38	271.4	0.61	-0.860	-0.091
1947.27	268.4	0.67	2.618	-0.067
1948.48	258.1	0.76	0.171	-0.027
1949.21	256.1	0.73	2.442	-0.087
1950.34	248.7	0.79	1.077	-0.072
1951.34	243.3	0.91	0.533	0.012
1952.36	238.8	0.91	0.616	-0.021
1953.34	235.9	0.94	1.838	-0.019
1955.03	229.6	1.02	2.166	0.023
1956.31	224.3	1.00	1.595	-0.019
1957.43	221.8	1.03	3.091	-0.003
1958.37	217.9	1.04	2.470	-0.002
1959.98	212.0	1.05	2.078	-0.003
1961.16	208.6	1.05	2.657	-0.008
1962.16	205.6	1.03	3.003	-0.031
1963.21	199.5	1.07	0.399	0.006
1964.41	195.3	0.99	0.177	-0.076
1965.30	193.3	1.08	1.118	0.012
1966.33	188.9	1.06	0.108	-0.010
1967.65	184.4	1.08	-0.070	0.007
1970.21	175.7	1.11	-0.498	0.025
1973.35	167.1	1.17	0.728	0.061
1974.48	162.0	1.22	-0.956	0.099
1977.14	156.9	1.17	1.666	0.014
1979.77	148.1	1.20	0.000	0.000
1982.24	140.6	1.35	-1.295	0.102
1984.61	133.1	1.39	-3.301	0.090
1985.31	131.2	1.36	-3.666	0.044

1987.33	129.9	1.28	-0.736	-0.086
---------	-------	------	--------	--------

4.- Aplicación del método al par ADS 13169.

Siguiendo el mismo esquema del caso anterior, hemos elegido los siguientes lugares normales

	t	θ	ρ
1	1918.6	155°.3	
2	1944.	248°.2	0.294
3	1969.	294°.4	0.450
4	1995	326°.6	0.410

que nos han permitido obtener los valores

N = 4.7345694341517	p = -0.01276651179404
Q = 4.750853294994	q = -0.98658046544215
R = 0.8086932172204	h = 2.64996637066096
S = 0.97124777084622	k = 2.85137194076961

La resolución del sistema fundamental, aplicando la interpolación lineal y el cálculo simbólico, ha dado, finalmente, los siguientes resultados:

$$\begin{aligned} V &= 118^\circ.3276387856569 \\ U &= 60^\circ.197156572921 \\ W &= 191^\circ.303094062322 \end{aligned}$$

con los residuos finales

$$\begin{aligned} \text{HVS}(;1) &= -8.3266728 \cdot 10^{-17}; & \text{HVS}(;2) &= 0.85681457 \cdot 10^{-4}; & \text{HVS}(;3) &= -1.7763568 \cdot 10^{-15} \end{aligned}$$

Con estos resultados, los elementos orbitales obtenidos fueron los siguientes:

$$\begin{aligned} a &= 0''.38103020470012 & P &= 128^a .707269854584 \\ T &= 1905.513475886528 & e &= 0.5348113049649 \\ \omega &= 336^\circ.7089542818111 & \Omega &= 130^\circ.9560629580809 \\ I &= 49^\circ.96084241957239 \end{aligned}$$

que hemos utilizado para la obtención de las diferencias observación-cálculo en ángulos y distancias, cuyos resultados se incluyen en el siguiente cuadro de valores:

t	θ°	ρ''	$\Delta\theta^\circ$	$\Delta\rho''$
1903.51	105.9	0.28	-2.497	0.018
1915.15	146.1	0.31	1.268	0.018
1918.60	153.6	0.30	-1.706	0.016
1921.08	167.0	0.29	3.702	0.016
1923.64	171.7	0.26	-0.399	-0.007
1924.67	176.1	0.25	0.287	-0.013
1939.94	233.8	0.28	-1.422	0.010
1943.77	246.3	0.29	-1.223	-0.003
1944.36	250.5	0.33	1.254	0.034
1948.66	261.0	0.26	0.490	-0.067
1948.71	261.2	0.29	0.572	-0.037
1950.64	257.0	0.24	-8.010	-0.101
1951.76	265.3	0.35	-2.089	0.000
1952.66	264.5	0.30	-4.722	-0.056
1953.70	267.4	0.38	-3.857	0.017
1956.78	273.7	0.39	-3.126	0.005
1957.48	276.7	0.39	-1.307	0.000
1961.57	285.8	0.38	1.397	-0.035
1962.49	288.5	0.38	2.769	-0.035
1962.62	280.1	0.37	-5.812	-0.051
1972.71	281.8	0.38	-4.240	-0.042
1962.80	285.5	0.43	-0.674	0.008
1965.75	290.9	0.40	0.679	-0.037
1966.72	291.1	0.50	-0.392	0.059
1969.73	296.4	0.44	1.089	-0.012
1969.75	294.4	0.45	-0.933	-0.003
1974.53	298.9	0.45	-2.177	-0.014
1974.72	304.6	0.43	3.305	-0.034
1975.66	299.3	0.48	-3.101	0.015
1978.61	305.7	0.41	-0.133	-0.057
1978.62	303.7	0.43	-2.142	-0.037
1980.73	306.6	0.34	-1.694	-0.126
1981.63	311.0	0.54	1.655	0.075
1982.72	316.4	0.45	5.777	-0.013
1984.58	314.9	0.39	2.064	-0.069
1984.63	309.9	0.38	-2.997	-0.079
1986.80	316.2	0.53	0.663	0.077
1987.75	315.9	0.40	-0.820	-0.049
1988.74	318.6	0.44	0.631	-0.005
1988.74	318.8	0.48	0.831	0.035
1989.63	317.7	0.47	-1.514	0.029
1989.63	317.6	0.49	-1.414	0.049
1989.65	318.9	0.37	-0.246	-0.071
1990.55	317.7	0.50	-2.633	0.063

1990.55	316.2	0.51	-4.133	0.073
1994.77	325.2	0.46	-1.057	0.049
1997.62	324.8	0.50	-5.983	0.109
1999.50	331.2	0.45	-2.793	0.075
1999.50	330.9	0.45	-3.091	0.075

5.- Integración de la ecuación diferencial en una formulación regularizada y universal del movimiento kepleriano.

La ecuación diferencial que rige el movimiento kepleriano de una masa puntual $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$, con respecto a un centro de fuerzas 0, viene dado, con μ constante, por la igualdad

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{\mu}{r^3} \mathbf{r}$$

La solución general de esta ecuación contiene seis constantes de integración, de las cuales son conocidas, tres del momento angular \mathbf{C} y una de la energía h . En estas condiciones, la búsqueda de las dos integrales que se necesitan para resolver el problema en una formulación regularizada y universal, ha sido desarrollado por J.M. Correas en su artículo *Sistematización del cálculo de órbitas* (1974), introduciendo los cambios de variables $dt = r ds$ y $ds = r d\phi$. En lo sucesivo, las derivadas primera y segunda de \mathbf{r} con respecto a la variable s , serán escritas en la forma \mathbf{r}' y \mathbf{r}'' .

En todo caso, designando por \mathbf{u} el vector unitario que define la dirección de \mathbf{r} , la resolución queda reducida a las ecuaciones

$$r'' - 2hr = \mu, \quad \frac{d\mathbf{u}}{d\phi} = \mathbf{C} \times \mathbf{u}, \quad r'^2 + C^2 = 2r(\mu + hr).$$

A continuación vamos a calcular la integral de la primera ecuación diferencial, que es de segundo orden, utilizando el cálculo simbólico. Así, aplicando la instrucción

$$\mathbf{r} = \text{dsolve}('D_{2r} - 2*h*r = 0', 's')$$

obtenemos la solución general de la ecuación homogénea

$$\mathbf{r} = \mathbf{C}_1 * \exp(s\sqrt{2h}) + \mathbf{C}_2 * \exp(-s\sqrt{2h})$$

como combinación lineal de las dos soluciones, aunque por ser igual a 1 el valor de ambas soluciones, para $h=0$, no forman, por tanto, un sistema fundamental.

No obstante, si tenemos dos soluciones de una ecuación diferencial, cualquier combinación lineal de ellas es también solución. En particular, tomando

$$x(s,h) = \frac{1}{2} [\exp(s\sqrt{2h}) + \exp(-s\sqrt{2h})]$$

$$y(s,h) = \frac{1}{2\sqrt{2h}} [\exp(s\sqrt{2h}) - \exp(-s\sqrt{2h})]$$

las funciones $x(s,h)$, $y(s,h)$, son soluciones de la ecuación diferencial, para $h \neq 0$, en tanto que, para $h = 0$, por no estar bien definida la función $y(s,h)$, podemos tomar (para $h \rightarrow 0$)

$$y(s,h) = \lim_{h \rightarrow 0} y(s,h) = s$$

puesto que el wronskiano W de estas soluciones verifica la condición

$$W(s,h) = \det[x \ y; \text{diff}(x,'s') \ \text{diff}(y,'s')] = 1$$

Esta elección de las soluciones particulares permite obtener la solución general de la ecuación homogénea

$$r = C_1 + C_2 * s$$

para $h \rightarrow 0$, como un caso particular de la ecuación

$$r = C_1 * x(s,h) + C_2 * y(s,h)$$

Para integrar la ecuación $r'' - 2hr = 1$, utilizamos el comando

$$r_1 = \text{dsolve}('D_{2r} - 2 * h * r - 1 = 0', 's')$$

que proporciona la solución

$$r_1 = -\frac{1}{2 \cdot h} + C_1 * \exp(s\sqrt{2h}) + C_2 * \exp(-s\sqrt{2h})$$

singular para $h=0$. Por tanto, si tomamos la igualdad

$$r_1 = -\frac{1}{2 \cdot h} + \frac{\exp(s\sqrt{2h})}{4h} + \frac{\exp(-s\sqrt{2h})}{4h}$$

verificando, para $h \rightarrow 0$, la condición

$$\lim r = \lim \frac{x(s,h) - 1}{2h} = (s^2/2)$$

obtenemos como solución general de la ecuación, la expresión

$$r(s,h,C_1,C_2) = C_1 * x(s,h) + C_2 * y(s,h) + \mu \frac{x(s,h) - 1}{2h}$$

que es válido para cualquier valor de h .

Cuando es $h=0$, tenemos

$$r(s,0,C_1,C_2) = C_1 + C_2 * s + (s^2/2)$$

y si en la expresión general sustituimos la variable s por 0, resulta

$$r_0 = \text{subs}(r,s,0) = C_1$$

Analogamente, haciendo lo mismo con la derivada respecto a s , es

$$r'_0 = \text{subs}(r',s,0) = C_2$$

siendo $r' = \text{diff}(r,s)$.

De esta forma la solución general de la ecuación diferencial, será

$$r(s,h) = r_0 * x(s,h) + r'_0 * y(s,h) + \mu \frac{x(s,h) - 1}{2h}$$

Bibliografía

- Berden, R.L. y Faries, J.D.: Análisis Numérico. Grupo Editorial Iberoamérica. Mexico. 1996.
- Cid, R.: Urania nº 252. Tarragona. 1960.
- Cid, R.: Rev. Academia de Ciencias de Zaragoza. t XV. 1960.
- Cid, R.: Discurso Académico. Rev. Academia de Ciencias de Zaragoza. 1979
- Cid, R. y Longás, C.: Rev. Academia de Ciencias de Zaragoza. t 48. 1993.
- Correas, J.M.: Sistematización del cálculo de órbitas. Tesis publicada en la Rev. Academia de Ciencias de Zaragoza. 1974.
- Longás, C.: Cálculo y corrección de órbitas de estrellas dobles visuales. Tesis. Facultad de Ciencias de Zaragoza. 1993.

Matlab: Edición del estudiante. Prentice-Hall Hestfordshire. 1995.

Nakamura, S.: Análisis Numérico y Visualización gráfica con Matlab. Prentice-Hall Hispanoamericana S.A. Mexico. 1997.

Quintela Estévez, P.: Introducción a Matlab y sus aplicaciones. Univ. de Santiago de Compostela. 1997.

G. Martín Martínez *, R.C. Díaz Ara **

* Ingeniero Técnico en Química Industrial

** Dpto. de Química Analítica.

Escuela Universitaria Politécnica de Huesca.

Ctra. Zaragoza, s/n. 22071 Huesca.

Abstract:

A study of analytical comparison methods for the determination of some anions (fluoride and chloride) in wine samples has been realized. The results with the alternative analytical method proposed are comparable to the obtained by the reference official method, for 50 samples of Spanish wines.

1.- Introducción.

En un reciente trabajo se han determinado la acidez y varios cationes que son mayoritarios en las uvas (sodio, potasio y calcio) o influyen en la estabilidad de los vinos (hierro y cobre), en 50 muestras de vinos españoles (1). De ellas, 27 son de denominación de origen y 23 son vinos de mesa. Predominan los tintos (25) sobre los rosados (16) y blancos (9). Entre las denominaciones de origen aparecen vinos de la Ribera del Duero, Ribera del Arlanza, Rioja, La Mancha, Valencio, Lanzarote, Penedés, Rueda, Somontano, Cariñena y Jomilla. Para completar el estudio se han determinado posteriormente fluoruro y cloruro en estas mismas muestras por dos métodos analíticos diferentes, comparando los resultados obtenidos con los que señala la legislación de calidad de vinos. El fluoruro se incorpora al vino a través de la adición de compuestos fluorados como insecticidas o amilfermentos. El límite máximo permitido por la Organización Internacional del Vino, es de 1 mg/l. Con respecto al cloruro, se presenta en el vino en forma de cloruro sódico. A elevadas concentraciones indica la existencia de prácticas fraudulentas no autorizadas (2,3). Comparando los resultados

**COMPARACION DE METODOS ANALITICOS
EN LA DETERMINACION DE PARAMETROS DE CALIDAD DE VINOS
PARTE II: DETERMINACION DE ANIONES.**

G. Martín Martínez *, R.C. Díaz Ara **

*** Ingeniero Técnico en Química Industrial**

**** Dpto. de Química Analítica.**

Escuela Universitaria Politécnica de Huesca.

Crtra. Zaragoza, s/n. 22071 Huesca.

Abstract:

A study of analytical comparison methods for the determination of some anions (fluoride and chloride) in wine samples has been realized. The results with the alternative analytical method proposed are comparable to the obtained by the reference official method, for 50 samples of Spanish wines.

1.- Introducción.

En un reciente trabajo se han determinado la acidez y varios cationes que son mayoritarios en las uvas (sodio, potasio y calcio) o influyen en la estabilidad de los vinos (hierro y cobre), en 50 muestras de vinos españoles (1). De ellas, 27 son de denominación de origen y 23 son vinos de mesa. Predominan los tintos (25) sobre los rosados (16) y blancos (9). Entre las denominaciones de origen aparecen vinos de la Ribera del Duero, Ribera del Arlanza, Rioja, La Mancha, Valencia, Lanzarote, Penedés, Rueda, Somontano, Cariñena y Jumilla. Para completar el estudio se han determinado posteriormente fluoruro y cloruro en estas mismas muestras por dos métodos analíticos diferentes, comparando los resultados obtenidos con los que señala la legislación de calidad de vinos. El fluoruro se incorpora al vino a través de la adición de compuestos fluorados como insecticidas o anti fermentos. El límite máximo permitido por la Organización Internacional del Vino es de 1 mg.l^{-1} . Con respecto al cloruro, se presenta en el vino en forma de cloruro sódico. A elevadas concentraciones indica la existencia de prácticas fraudulentas no autorizadas (2,3). Comparando los resultados

obtenidos en las determinaciones de sodio y cloruro se ha observado que las muestras con mayor contenido en sodio son las que presentan los valores más elevados para el cloruro.

2.- Parte experimental.

2.1. Aparatos.

Para la determinación por electrodos selectivos se ha utilizado un medidor de pH/mV Orion 920 A. Los electrodos selectivos son Orion 94-09 (fluoruro) y 94-17 B (cloruro). Como electrodos de referencia se han usado el de Ag/AgCl, KCl sat., de unión simple, Orion 90-01, para el fluoruro y de Ag/AgCl, KCl sat., de doble unión, Orion 90-02, con KNO₃ al 10 % (m/v) como disolución de relleno de la cámara exterior, para el cloruro (4).

2.2. Reactivos.

Los reactivos son de calidad analítica Merck y Orion.

2.3. Procedimientos.

2.3.1 Toma de muestra.

Las muestras se han guardado en frascos de vidrio, preservado de la luz solar y mantenidos a temperatura ambiente. La referencia completa de cada muestra aparece en la publicación del ya citado anterior trabajo sobre determinación de algunos cationes relacionados con la calidad de los vinos (1).

3.- Resultados y discusión.

3.1. Determinación de fluoruro.

Los valores que se han obtenido se muestran en la Tabla I y se expresan en mg.ml⁻¹.

TABLA I

Muestra	a) Concentración de fluoruro	b) Concentración de fluoruro	c) Concentración de cloruro	d) Concentración de cloruro.
1	0,18	0,18	50,9	51,6
2	0,23	0,20	32,8	34,3
3	0,22	0,20	62,9	67,9
4	0,15	0,15	36,7	37,3
5	0,12	0,11	82,9	83,9
6	0,23	0,23	56,0	50,7

7	0,19	0,18	22,9	23,3
8	0,16	0,16	32,1	30,3
9	0,24	0,22	76,1	70,4
10	0,15	0,13	66,0	64,2
11	0,17	0,16	52,2	48,1
12	0,28	0,26	50,1	48,6
13	0,27	0,25	86,2	79,4
14	0,13	0,12	32,3	30,8
15	0,29	0,27	34,0	29,6
16	0,17	0,16	50,1	49,3
17	0,15	0,13	32,2	28,5
18	0,16	0,14	46,9	51,3
19	0,17	0,14	34,8	35,9
20	0,46	0,43	136,1	130,7
21	0,53	0,49	52,7	51,4
22	0,17	0,15	54,9	55,7
23	0,20	0,18	52,6	51,9
24	0,19	0,17	50,8	55,1
25	0,19	0,17	70,9	73,8
26	0,11	0,09	34,6	35,6
27	0,27	0,25	82,8	84,8
28	0,19	0,19	75,0	72,4
29	0,18	0,16	130,8	132,0
30	0,17	0,15	98,9	103,0
31	0,18	0,17	74,5	79,7
32	0,36	0,33	90,7	94,3
33	0,20	0,19	90,4	94,3
34	0,16	0,14	36,0	36,8
35	0,19	0,17	51,9	54,8
36	0,21	0,19	41,0	40,5
37	0,29	0,27	48,9	50,4
38	0,27	0,24	58,8	61,7
39	0,23	0,20	50,1	49,8
40	0,18	0,18	54,5	54,6
41	0,19	0,17	34,7	38,9
42	0,24	0,23	68,1	66,4
43	0,32	0,30	72,8	75,9
44	0,21	0,21	60,8	67,5
45	0,19	0,18	38,9	40,1
46	0,29	0,27	72,1	70,3
47	0,21	0,20	50,9	54,3
48	0,24	0,21	66,0	64,6
49	0,17	0,17	72,2	71,5
50	0,31	0,28	90,9	98,0

Tabla 1.- Valores de fluoruro y cloruro obtenidos en las muestras de vino analizadas. a) Valores obtenidos por adición estandar simple con electrodo de fluoruro (5,6). b) Valores obtenidos por adición estandar múltiple con electrodo de fluoruro (5,6). c) Valores obtenidos por valoración potenciométrica (6). d) Valores obtenidos por el método de Volhard (7,8)

3.2. Determinación de cloruro.

Como método alternativo al de referencia se propone la valoración potenciométrica con nitrato de plata, usando un electrodo selectivo de cloruro para seguir la valoración. Se sumerge el electrodo y se valora agitando, hasta la obtención del potencial del punto de equivalencia. Con los datos, como los obtenidos en la Tabla II, se representan las curvas de valoración potenciométricas que aparecen en las Figuras 1-3 (v es el volumen, en ml, de nitrato de plata añadido).

TABLA II

Volumen AgNO ₃ (ml)	Potencial E (mV)	1 ^a Derivada (DE/Dv)	2 ^a Derivada (D ² E/Dv ²)
0	191,4		
1	193,8	2,4	
2	196,9	3,7	1,3
3	200,9	4,0	0,3
4	205,4	4,5	0,5
4,2	211,5	6,1	1,6
4,4	219,9	8,4	2,3
4,6	243,3	23,4	5,0
4,8	275,8	32,5	9,1
5	329,2	53,4	20,9
5,2	357,2	28,0	-25,4
5,4	374,3	17,1	-10,9
5,6	384,3	10,0	-7,1
5,8	389,7	5,4	-4,6
6	396,1	6,4	-1,0
7	399,8	3,7	-2,7
8	402,2	2,4	-1,3
9	406,1	3,9	-1,5
10	409,4	3,3	-0,6

Tabla II.- Datos obtenidos en la valoración potenciométrica de cloruro con nitrato de plata.

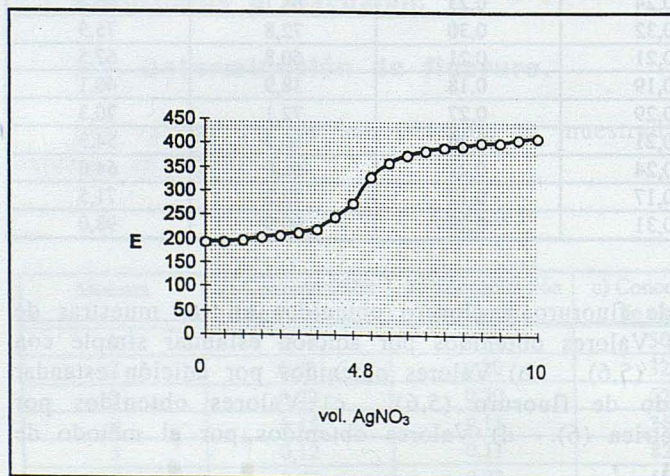


Fig. 1.- Variación del potencial con el volumen de nitrato de plata añadido.

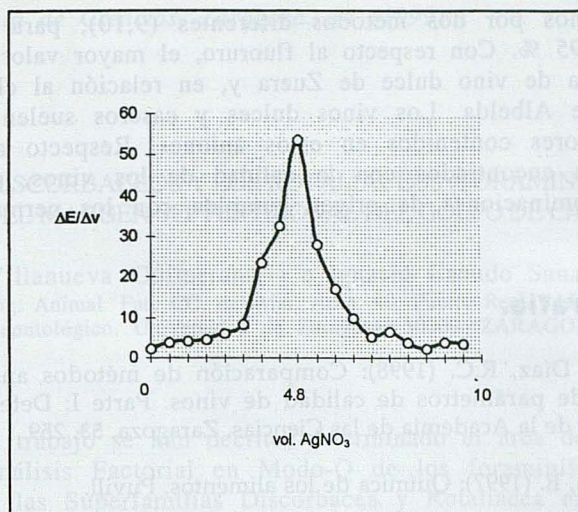


Fig. 2.- $\Delta E/\Delta v$ frente al volumen de nitrato de plata añadido.

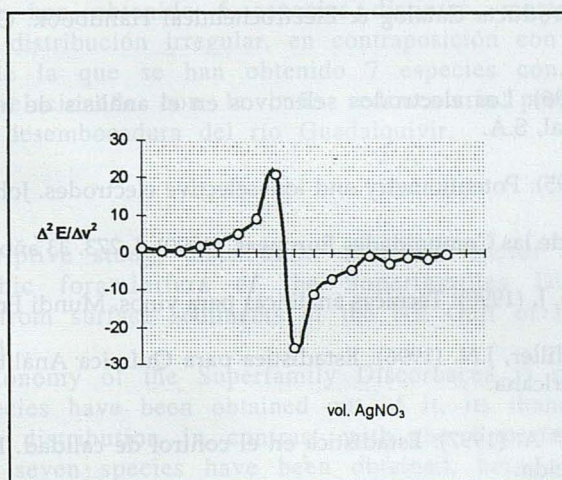


Fig. 3.- $\Delta^2 E/\Delta v^2$ frente al volumen de nitrato de plata añadido.

Tras las determinaciones por valoración potenciométrica, los resultados obtenidos en la determinación de cloruro se muestran en la Tabla I.

4.- Conclusiones.

Por consideraciones de tipo estadístico se concluye que los resultados obtenidos son similares para la determinación de fluoruro y

cloruro en vinos por dos métodos diferentes (9,10), para un nivel de confianza del 95 %. Con respecto al fluoruro, el mayor valor se encuentra en una muestra de vino dulce de Zuera y, en relación al cloruro, en un vino casero de Albelda. Los vinos dulces y caseros suelen ser los que presentan mayores contenidos en estos aniones. Respecto a la relación de los valores encontrados con la calidad de los vinos, prácticamente todas las denominaciones de origen cumplen con los permitidos por la legislación.

5.- Bibliografía.

- (1) Martín, G., Díaz, R.C. (1998): Comparación de métodos analíticos en la determinación de parámetros de calidad de vinos. Parte I: Determinación de cationes. Revista de la Academia de las Ciencias. Zaragoza, 53, 259.
- (2) Primo Yúfera, E. (1997): Química de los alimentos. Puvill.
- (3) Ribereau-Gayon, P., Peynaud, E., Sudraup, P. (1993): Ciencia y técnicas del vino. Análisis y control de los vinos. Mundi Prensa.
- (4) Laboratory Products Catalog & Electrochemical Handbook. Orion Research (1999).
- (5) Godé, L. (1996): Los electrodos selectivos en el análisis de aguas. Gestió i Promoció Editorial, S.A.
- (6) Evans, A. (1995): Potentiometry and ion-selective electrodes. John Wiley.
- (7) Diario Oficial de las Comunidades Europeas. (1990). L 273. 33 año.
- (8) García Barceló, J. (1990): Técnicas analíticas para vinos. Mundi Prensa.
- (9) Miller, J.C., Miller, J.N. (1996): Estadística para Química Analítica. Addison-Wesley Iberoamericana.
- (10) Colomer, M^a A. (1997): Estadística en el control de calidad. Edicions de la Universitat de Lleida.

LOS DISCORBACEOS Y LOS ROTALIACEOS (FORAMINIFERIDA) DEL MARGEN SEPTENTRIONAL DEL GOLFO DE CADIZ.

Perfecto Villanueva Guimerans⁽¹⁾ e Ignacio Canudo Sanagustín⁽²⁾.

(1) Dpto. Biolog. Animal. Fac. CC. del Mar. Apto. 40. Puerto Real. 11510 CADIZ. Spain.

(2) Museo Paleontológico. Universidad de Zaragoza. 50009. ZARAGOZA.

Resumen.

En este trabajo se han descrito, determinado el área de distribución y realizado Análisis Factorial en Modo-Q de los foraminíferos bentónicos recientes de las Superfamilias Discorbacea y Rotaliacea existentes en los sedimentos superficiales de la costa y plataforma continental del margen septentrional del Golfo de Cádiz.

De la Superfamilia Discorbacea, que presenta una taxonomía compleja, se han obtenido 6 especies distintas, mostrando las tanatofacies una distribución irregular, en contraposición con la Superfamilia Rotaliacea de la que se han obtenido 7 especies con la tanatofacies claramente relacionada con la cuña sedimentaria progradante procedente de la desembocadura del río Guadalquivir.

Abstract.

A descriptive study, distribution area and Factor Analysis of the recent benthic foraminifera of the Superfamilies Discorbaceae and Rotaliaceae from surface sediments of the NE Gulf of Cadiz have been accomplished.

The taxonomy of the Superfamily Discorbacea is complex and six different species have been obtained out of it, its thanatofacies present an irregular distribution in contrast with the Superfamily Rotaliacea from which seven species have been obtained, being its thanatofacies related to the mud prodeltaic deposits that are prograding to sand transgressive preceding.

Introducción.

Debido fundamentalmente a su extraordinaria variabilidad y plasticidad morfológica, son quizás los foraminíferos, los organismos marinos que presentan mayor dificultad taxonómica estando las diversas clasificaciones existentes sujetas a modificaciones constantes, bien por aparición de nuevos taxones o por reubicación de algunos ya existentes conforme se va incrementando el conocimiento de los mismos. Se han considerado tradicionalmente como el principal Orden de la Clase

Granuloreticulosa del Subfilo Sarcodina ordenación mantenida en la clasificación de Loeblich y Tappan (1988), aunque otras clasificaciones los consideran dentro del Reino Proctotista como Clase Foraminifera, elevando las categorías de numerosos taxones (Lee, 1989). Se encuentran en casi todos los medios marinos y son de los pocos protozoos que biomineralizan la superficie celular con una permanente concha, lo que ha permitido su conservación como fósiles desde el Cámbrico. En la actualidad se conocen más de cuatro mil especies que viven en los distintos mares y océanos, su distribución geográfica y batimétrica es muy amplia y desde el punto de vista ecológico constituyen series dinámicas de poblaciones que están en adaptación constante siendo de gran interés su estudio, fundamentalmente en temas (paleo)ecológicos y oceanográficos. Aunque existen muchas especies planctónicas, desde el punto de vista cuantitativo la mayor parte son bentónicas, en uno de cuyos grandes Subordenes (Rotaliina) se encuentran integrados los Discorbaceos y los Rotaliaceos, moderadamente abundantes en medios litorales y de constitución morfológica muy compleja. La primera referencia de ellos se encuentra ya en los pioneros trabajos de Lamarck (1804) que en la descripción de un importante número de especies fósiles de las proximidades de París crea los géneros predecesores Discorbis y Rotalia, algunas clasificaciones realizadas el siglo pasado incluyen a la Familia Rotaliidae apareciendo posteriormente la Discorbidae. Loeblich y Tappan (1988) los describen en base a los siguientes caracteres con la categoría taxonómica de Superfamilias:

Superfamilia DISCORBACEA Ehrenberg, 1838: "Concha multilocular trocospiralada baja, pared calcárea radial e hialina, perforada, abertura interiomarginal en la cara umbilical, rodeada por un área no perforada o por un labio".

Superfamilia ROTALIACEA Ehrenberg, 1839: "Concha multilocular trocospiralada o planispiralada, involuta o evoluta, pared calcárea, hialina, perforada, abertura primaria simple o múltiple a lo largo de las suturas, las placas septales pueden cerrar las aberturas, los canales radiales y las cavidades umbilicales"

En este trabajo, que forma parte de un estudio más amplio (Villanueva Guimerans, 1994), se pretende profundizar en el conocimiento de las especies recientes, pertenecientes a estas Superfamilias, existentes en los sedimentos superficiales de una amplia zona Atlántica Ibérica localizada entre la desembocadura del río Guadalquivir y el Cabo Trafalgar (Fig. 1) en cuanto a la taxonomía y la relación de cada una de ellas con las características batimétricas y granulométricas (autoecología) del medio. En el litoral ibérico, como antecedentes existen varios trabajos foraminiferológicos marinos, tales como los de: Galhano, 1963;

Mateu, 1970; Colom, 1974; Ubaldo y Palmeiro, 1978; Sánchez Ariza, 1979; Pascual, 1984; Cearreta, 1989; Lévy et al., 1995 y Schönfeld, 1997.

Nota: Las figuras, láminas y tablas se incluyen al final del texto.

Características oceanográficas y granulométricas.

El intercambio de agua entre el Atlántico y el Mediterráneo es el proceso determinante en la hidrodinámica del Golfo de Cádiz, en superficie la corriente circula anticiclónicamente por el margen continental ibérico entre el Cabo de San Vicente y Tarifa con dirección O-E, en el margen africano la circulación se efectúa en sentido N-S para reunirse posteriormente con la corriente general atlántica hacia el SSO. Las corrientes litorales siguen la orientación de la costa afectadas por el régimen de mareas. En la plataforma continental próxima a Cádiz, se ha encontrado Agua Superficial Atlántica hasta unos 140 metros, a mayor profundidad se detecta Agua Central Noratlántica, solamente a profundidades superiores a los 200 metros se nota una leve influencia del flujo mediterráneo de salida, siendo más nítido a partir de 500 metros (Villanueva Guimerans y Gutiérrez, 1994).

Los materiales sedimentarios que ocupan esta parte de la plataforma continental y Bahía de Cádiz, son de naturaleza detrítica, con predominio de las fácies arenoso-cuarcíticas y fangosas (Segado et al., 1984). Su distribución, bajo un punto de vista granulométrico, presenta una orientación general paralela a la línea de costa y a la dirección de las isóbatas, sobre todo en el sector Norte de la zona alternándose formaciones arenosas con otras de predominio limoso y arcilloso, esta distribución parece indicar la existencia, de una dinámica sedimentaria progradante (Gutiérrez et al., 1993) (Fig. 2).

Material y métodos.

Se han analizado un total de 50 muestras superficiales (Fig.1) obtenidas con cuchara tipo Shipek. La extracción de los organismos de cada muestra se realizó a partir del cuarteado de la fracción mayor a 125 micras obteniéndose en cada caso un mínimo de 300 ejemplares (Buzas, 1990). La determinación taxonómica se hizo con lupa binocular y con el Microscopio Electrónico de Barrido, en la clasificación supra-específica se siguió fielmente el Tratado de Loeblich y Tappan (1988), para la especie se utilizó un amplio catálogo de libros, revistas, guías, etc, aunque en las sinonimias, con el objetivo de acortar y simplificar el trabajo, sólo aparecen la cita original y la última consultada. Los valores correspondientes a la frecuencia en la distribución de las distintas especies se refieren al total de los foraminíferos bentónicos encontrados en la zona (Villanueva Guimerans, 1994) y en cada género las distintas

especies se encuentran ordenadas en orden decreciente según la frecuencia relativa de cada una de ellas. El Análisis Multivariante se realizó mediante el programa B.M.D.P. utilizando en este caso la frecuencia relativa de cada una de las especies dentro de las Superfamilias. Los análisis granulométricos se hicieron por tamización siguiendo la escala de intervalos de tamaño propuesta por Whentworth (1922), la determinación de los carbonatos con el calcímetro de Bernard y la materia orgánica por el método de Gaudette et al., (1974).

Resultados.

Se han obtenido un total de 14 especies distintas cuya clasificación, descripción y distribución resultó ser la siguiente:

Superfamilia	Familia	Genero	Especie
DISCORBACEA	BAGGINIDAE	Cancris	Cancris auriculatus
		Valvulineri	Valvulineria bradyana
	EPONINIDAE	Eponides	Eponides concameratus
	ROSALINIDAE	Gavelinopsis	Gavelinopsis praegeri
		Rosali	Rosalina globularis
ROTALIACIA	SPHAEROIDINIDAE	Sphaeroidin	Sphaeroidina bulloides
	ROTALIIDAE	Ammonia	Ammonia becarii
			Ammonia becarii inflata
	ELPHIDIIDAE	Criboelphidium	Criboelphidium vades-cens
			Criboelphidium cuvillieri
		Elphidium	Elphidium advenum
			Elphidium macellum
			Elphidium crispum
			Elphidium coplanatum

Superfamilia **DISCORBACEA** Ehrenberg, 1838. Familia **BAGGINIDAE** Cushman, 1927. Género **Cancris** de Monfort, 1808. **Cancris auriculatus** (Fichtel y Moll). Lámina I, Figs. 1a-1b-1c.

1798 *Nautilus auricula* Fichtel y Moll:108, lám. 20, fig. a-c.

1996 *Cancris auriculatus* (Fichtel y Moll) -Revets: 76, lám. 10, figs. 5-8.

Descripción: Concha de contorno ovalado-auriculado, lenticular en sección transversal, más convexa en la cara umbilical, periferia redondeada y carenada. Cámaras lobuladas que se incrementan rápidamente de tamaño, de 8 a 10, la última ocupa casi la mitad de la concha. Suturas hundidas y curvadas, casi radiales alrededor de la abertura umbilical, poco marcadas en la cara opuesta, abertura en forma semicircular, con una placa abertural gruesa que se proyecta desde la base de la última cámara sobre el ombligo. Pared con poros circulares de unas 1,5 micras, con un área no perforada cercana a la abertura, superficie lisa. Tamaño.- Largo: Sobre 1 mm; Ancho: 0,60 mm.

Distribución: Especie de temperaturas templadas y cálidas (Murray, 1973), en el litoral ibérico ha sido hallada en las costas cantábricas y gallegas (Colom, 1974), en las de Motril-Nerja (Sánchez-Ariza, 1979) y en la plataforma continental interna portuguesa (Lévy et al., 1995). En la zona de estudio (Fig. 3) se encuentra en el sector Sur entre los 20 y los 500 metros de profundidad en sustratos principalmente arenosos con bajos contenidos de materia orgánica.

Género *Valvulineria* Cushman, 1926. *Valvulineria bradyana* (Fornasini). Lámina I, Figs. 2a-2b.

1900 *Discorbina bradyana* Fornasini: 393, fig. 43.

1991 *Valvulineria bradyana* (Fornasini, Cimerman y Langer: 64, lám. 67, figs. 8-10.

Descripción: Concha ligeramente más larga que ancha, contorno redondeado. Cámaras pseudotriangulares, incrementan regularmente de tamaño desde el prolóculo hasta la más externa, en total de 10 a 12, lobuladas. Cara espiral con aspecto de aplanado a moderadamente convexo, cara umbilical muy convexa con el ombligo central hundido. Suturas intercamerales rectas, gruesas, radiales y deprimidas en la cara umbilical y ligeramente curvadas en la espiral. Pared perforada con gruesos poros (2-4 micras) que se disponen por toda la concha. Abertura en forma de arco umbilical-extraumbilical con placa abertural que se proyecta sobre el ombligo llegando a cubrir las primeras cámaras. Tamaño.- Largo: De 0,40 a 0,50 mm; Ancho: De 0,35 a 0,45 mm.

Distribución: Especie frecuente en los fondos fangosos catalanes (Mateu, 1970), en las costas gallegas y cantábricas (Colom, 1974) y en el litoral Motril-Nerja (Sánchez-Ariza, 1979). En la zona de estudio muy abundante (Fig. 4), se encuentra fundamentalmente en los sustratos fangosos de alto contenido en materia orgánica existentes en una amplia área que comprende prácticamente todo el sector Norte, desde el paralelo de Chipiona hasta el de San Fernando, entre los 20 y los 200 metros de profundidad. También se han obtenido ejemplares hacia el Sur, entre los 100 y 200 metros en fondos fango-arenosos.

Familia **EPONIDIDAE** Hofker, 1951. Género **Eponides** de Montfort, 1808. *Eponides concameratus* (Williamson). Lámina I, Figs. 3a-3b.
1858 *Rotalina concamerata* Williamson: 52, lám. 67, figs. 101-102.
1991 *Eponides concameratus* (Williamson) -Cimerman y Langer: 64, lám. 67, figs. 11-14.

Descripción: Concha robusta, de planoconvexa a ligeramente biconvexa, periferia provista de una gruesa carena, cara dorsal evoluta, algo redondeada. Cámaras que incrementan en tamaño dando unas 2,5 a 3 vueltas, las dos últimas visibles en la cara dorsal y con unas seis visibles en la cara umbilical involuta y convexa. Suturas intercamerales en la cara dorsal curvadas y gruesas, en la umbilical algo deprimidas y radiales. Pared ornamentada en la cara dorsal con gruesas pústulas, más suaves en la cara umbilical perforada con poros redondos de unas 2 micras. Abertura de unas 200 micras en la base interiomarginal de la última cámara, arqueada, extendiéndose desde el ombligo hasta la periferia bordeada por un estrecho labio. Tamaño.-Largo: De 0,8 a 1 mm; Ancho: Sobre 0,65 mm.

Distribución: En el litoral ibérico, rara en las costas del Algarve (Galhano, 1963), común en los fondos fangosos catalanes (Mateu, 1970) y en la costa S-SO de Portugal (Ubaldo y Otero, 1978). En la zona de estudio (Fig. 5) se ha localizado en dos áreas, una situada en la Bahía externa y la plataforma continental próxima, a partir de los 18 metros en substratos areno-fangosos y la otra situada en el sector Sureste, en substratos arenosos.

Familia **ROSALINIDAE** Reiss, 1963. Género **Gavelinopsis** Hofker, 1951 *Gavelinopsis praegeri* (Heron-Allen y Earland). Lámina I, Figs. 4a-4b.
1913 *Discorbina praegeri* Heron-Allen y Earland: 122, lám.10, figs. 8-10.
1993 *Gavelinopsis praegeri* (Heron-Allen y Earland) -Sgarrella y Monchermont-Zei: 218, lám. 17, figs 1-2.

Descripción: Concha cónica o planoconvexa ligeramente lobulada, periferia aguda provista de una pequeña carena. Cámaras en 2 o 3 vueltas, de 6 a 7 en la vuelta final. Suturas intercamerales hundidas, de curvadas a radiales, bordeadas por pequeños gránulos, se alargan hasta el ombligo. Desde el margen umbilical de cada cámara se extiende sobre la región umbilical una proyección calcárea formando una pequeña quilla, las proyecciones de todas las cámaras umbilicales se pueden fusionar en la región central. Pared perforada con poros gruesos en los márgenes suturales y finos en el resto, superficie algo rugosa. Abertura baja, internomarginal en forma de arco extraumbilical recubierta por una expansión de la última cámara. Tamaño: De 0,25 a 0,35 mm de diámetro.

Distribución: En las costas ibéricas ha sido encontrada a lo largo de toda la plataforma continental portuguesa, especialmente bien representada en la región Sur-Suroeste y en el Algarve (Lévy et al., 1995): En la zona de estudio (Fig. 6) se ha localizado en tres áreas distintas, una ocupa toda la Bahía externa y la plataforma continental próxima desde los 8 a los 75 metros de profundidad, en substratos detríticos constituidos mayoritariamente por arenas de tamaño medio a grueso y localmente grava, otra, en la plataforma continental media, entre los paralelos de Rota y San Fernando, de los 100 a los 200 metros de profundidad, en sedimentos de naturaleza areno-fangosa y la tercera, en el sector Sureste, entre los 280 y los 600 metros de profundidad, en substratos arenosos.

Género *Rosalina* d'Orbigny, 1826. *Rosalina globularis* d'Orbigny Lámina I, Figs. 5a-5b.

1826 *Rosalina globularis* d'Orbigny: 271, lám. 13, figs. 1-4.

1993 *Rosalina globularis* d'Orbigny -Sgarrella y Monchermont-Zei: 218, lám 17, figs. 7-8.

Descripción: Concha planoconvexa de forma irregular, cara dorsal convexa evoluta y umbilical involuta. Cámaras que incrementan rápidamente de tamaño, 10 visibles en la cara dorsal donde presentan suturas hundidas y oblicuas que se curvan hacia la periferia, en la cara umbilical son subtriangulares, 5 visibles ocupando la última aproximadamente 1/3 de la concha. Ombligo abierto. Pared perforada por gruesos poros. Abertura en la cara umbilical en forma de un arco bajo interiomarginal con un estrecho labio que la bordea. Tamaño: De 0,60 a 0,70 mm.

Distribución: En las costas ibéricas, frecuente en el litoral Motril-Nerja (Sánchez-Ariza, 1979), y rara en la plataforma continental portuguesa (Lévy et al., 1995). En la zona de estudio: (Fig. 7) se halla distribuida por toda la Bahía Externa y la plataforma continental próxima, desde los 8 a los 50 metros de profundidad en sedimentos detríticos constituidos mayoritariamente por arenas de tamaño medio a grueso.

Familia **SPHAEROIDINIDAE** Cushman, 1927. Género *Sphaeroidina* d'Orbigny, 1826. *Sphaeroidina bulloides* d'Orbigny. Lámina I, Fig. 6.

1826 *Sphaeroidina bulloides* d'Orbigny: 267.

1988 *Sphaeroidina bulloides* d'Orbigny -Loeblich y Tappan: 564, lám. 617, figs 1-6.

Descripción: Concha subglobular hialina y transparente de pequeño tamaño con las cámaras hemisféricas que se disponen en un enrollamiento variable de tal modo que la periferia la ocupan tres cubriendo la última a las dos precedentes, dando el aspecto de tres esferas unidas,

suturas intercamerales nítidamente marcadas. Abertura en forma de arco abierto situada en la base de la última cámara, encima de la intersección de las suturas correspondientes a las últimas tres cámaras, bordeada por un grueso labio y con una placa arqueada en el margen inferior. Pared lisa y finamente perforada. Tamaño: De 0,35 a 0,45 mm.

Distribución: En el litoral ibérico ha sido hallada en las costas de Galicia (Colom, 1974), en los fondos fangosos catalanes (Mateu, 1970) y a lo largo de las costas portuguesas, en la plataforma media y externa (Lévy et al., 1995), en la zona de estudio (Fig. 8) se ha localizado en el sector Oeste a profundidades superiores a 100 metros en substratos mayoritariamente areno-fangosos con tendencia a incrementar su frecuencia con la batimetría.

Superfamilia **ROTALIACEA** Ehrenberg, 1839. Familia **ROTALIIDAE** Ehrenberg, 1839. Género *Ammonia* Brünnich, 177 *Ammonia beccarii* Linneo. Lámina II, Figs. 1a-1b.

1758 *Ammonia beccarii* Linneo: 710.

1996 *Ammonia beccarii* Linneo -Villanueva-Guimerans y Sánchez-Ariza:23, fig. 6 (1a-1b).

Descripción: Concha ligeramente biconvexa, circular y perifericamente redondeada. Cámaras en trocospira baja, unas 3,5 a 4 vueltas visibles en la cara espiral evoluta, la cara umbilical involuta. De 10 a 12 cámaras cuadrangulares en la última vuelta espiral de crecimiento regular con las suturas intercamerales gruesas e imperforadas, algo curvadas y a veces más o menos limbadas. En la cara umbilical las cámaras, de 7 a 10, se presentan ligeramente infladas, terminan en una expansión umbilical a modo de placa, en el centro presenta un botón calizo y las suturas llegan a abrirse formando profundas hendiduras. Abertura, larga y estrecha, en la porción inferior frontal de la última cámara dirigida hacia la región umbilical. Tamaño. Muy variable, desde 0,35 a 1mm,

Distribución: Especie cosmopolita, de amplia distribución (Villanueva-Guimerans y Sánchez-Ariza, 1996). Se encuentra distribuida por casi toda la zona de estudio (Fig. 9) con tendencia de situarse principalmente en fácies fangosas, únicamente en las estaciones más distales situadas en el sector central no se han encontrado ningún ejemplar, la frecuencia es muy variable situándose las mayores concentraciones en el dominio infralitoral y en el interior de la Bahía, disminuyendo con la profundidad y distancia a la costa, los contenidos más altos se han encontrado en el Sector NE entre los 20 y 40 metros y los más bajos a nivel de la plataforma externa del sector Norte.

Ammonia beccarii inflata (Seguenza) Lámina II, Fig. 2.

1862 *Rosalina inflata* Seguenza: 106, lám. 1, fig. 6.

1996 *Ammonia beccarii inflata* (Seguenza) -Villanueva-Guimerans y Sánchez-Ariza:23, fig. 6 (2a-b).

Descripción: Concha más globosa que la forma típica, las cámaras más estrechas y enrolladas en trocospira alta, unas 4,5-5 vueltas visibles en la cara espiral, también presenta una serie de suturas pustulosas, cortas, irregulares que cubren casi toda la porción central de la cara umbilical. Tamaño: de 0,6 a 1,5 mm.

Distribución: En la zona de estudio se localiza en un área más restringida y en menor concentración que *A. beccarii s.s* situándose preferentemente en la Bahía y en el dominio infralitoral y plataforma interna del sector Norte, también se han encontrado ejemplares a 360 metros de profundidad mostrando una clara tendencia a disminuir el contenido con la distancia a la costa.

Familia **ELPHIDIIDAE** Galloway, 1933. Genero *Criboelphidium* Cushman y Brönnimann, 1948. *Criboelphidium vadesens* (Cushman y Brönnimann). Lámina II, Fig. 3.

1948 *Cribononion vadesens* Cushman y Brönnimann:18.

1988 *Criboelphidium vadesens* (Cushman y Brönnimann) -Loeblich y Tappan:673, lám. 784, figs. 1-14.

Descripción: Concha con enrollamiento planispiralado involuto de contorno circular y periferia redondeada. De 8 a 12 cámaras ligeramente infladas en la vuelta final. Suturas intercamerales radiales algo hundidas con gran cantidad de fosas circulares que se extienden desde la periferia hasta el ombligo ligeramente hundido. Pared perforada por gruesos poros en toda la superficie. Abertura interiomarginal en la base de la última cámara, pueden aparecer aberturas secundarias. Tamaño: De 0,35 a 0,45 de radio.

Distribución: Especie propia de aguas poco profundas, en el litoral Motril-Nerja es de las más abundantes (Sánchez-Ariza, 1979). En la zona de estudio (Fig. 10) ocupa principalmente una área desde el dominio infralitoral hasta los 100 metros de profundidad, encontrándose las mayores concentraciones en el interior de la Bahía disminuyendo con la profundidad, también se han encontrado algunos ejemplares en áreas aisladas de la plataforma externa.

Criboelphidium cuvillieri (Lévy). Lámina II, Fig. 4a-4b.

1966 *Elphidium cuvillieri* Lévy: 5, lám. 1, fig. 6.

1973 *Elphidium cuvillieri* Lévy -Haynes: 197, lám. 24, figs. 17-18, lám. 26, fig. 12.

Descripción: Concha planispiralada involuta, de contorno circular con la periferia redondeada en las primeras cámaras de la última vuelta y lobulada en las últimas. Unas 10 cámaras ligeramente infladas en la vuelta final, suturas intercamerales radiales. Pared perforada por gruesos poros de hasta 2 micras de diámetro en toda la superficie excepto en el área umbilical y en la cara apertural que es lisa. Abertura interiomarginal en la base de la última cámara.-Tamaño: Diámetro. De 0,35 a 0,45 mm.

Distribución: En el litoral ibérico ha sido localizada en la plataforma continental portuguesa (Lévy et al., 1995), en la zona de estudio (Fig. 11) al igual que *Criboelphidium vadesens* ocupa principalmente un área adyacente a la Bahía externa y el dominio infralitoral próximo, hasta los 75 metros de profundidad, también se han encontrado algunos ejemplares en áreas aisladas de la plataforma media y externa.

Género **Elphidium** de Monfort, 1808. *Elphidium advenum* (Cushman) Lámina II, Fig. 5.

1922 *Polystomella advena* Cushman: 56, lám. 9, figs. 11-12.

1980 *Elphidium advenum* (Cushman) -Boltovskoy et al.: 29, lám. 12, figs. 16-18.

Descripción: Concha planispiralada involuta y lenticular con el margen periférico redondeado. Cámaras ligeramente infladas, de 10 a 12 en la vuelta final que incrementan de tamaño. Suturas hundidas, marcadas por los procesos rectales que en esta especie son cortos. Abertura formada por una serie de pequeños poros redondos en la base de la cara abertural. Pared lisa, translúcida, finamente perforada con la zona umbilical algo deprimida con 1-5 pequeñas fosetas.-Tamaño: De 0,35 a 0,45 mm.

Distribución: En el litoral ibérico ha sido hallada en las costas catalanas (Mateu, 1970) y en la plataforma continental portuguesa (Lévy et al., 1995), en la zona de estudio (Fig. 12) se encuentra localizada en una amplia área que comprende prácticamente todo el sector Norte, desde el paralelo de Chipiona hasta el paralelo de Cabo Roche, entre los 20 a los 200 metros de profundidad, también se han obtenido ejemplares en el SO en el talud, los substratos en que se encuentra son mayoritariamente fangosos.

Elphidium macellum (Fichtel y Moll). Lámina II, Fig. 6.

1798 *Nautilus macellus* var. *beta* Fichtel y Moll: 66, lám. 10, figs. h-k.

1991 *Elphidium macellum* (Fichtel y Moll) -Cimernan y Langer: 78, lám. 89, fig. 9.

Descripción: Concha lenticular-biconvexa planispiralada involuta con el margen periférico subagudo con una gruesa quilla, en algunos ejemplares el borde de las primeras cámaras espinoso. Posee de 15 a 18 cámaras alargadas y estrechas en la vuelta final que presentan procesos de rectación del tamaño del ancho de la cámara y ocupan las 2/3 partes de cada una. Suturas intercamerales muy curvadas sobresaliendo los puentes rectales entre ellas. Región umbilical con un saliente umbonal irregular formado por pequeñas pústulas y nódulos. Abertura situada a lo largo de la base de la última cámara con aberturas suplementarias interiomarginales. Tamaño. De 0,45 a 1,70 mm. Se diferencia de *Elphidium crispum* por su menor tamaño y por la distinta configuración de la región umbonal existiendo formas de transición entre ambas.

Distribución: En el litoral ibérico se ha localizado en la plataforma continental portuguesa (Lévy et al., 1995), en la zona de estudio (Fig. 13) se localiza en tres áreas, una ocupa la Bahía externa y la plataforma interna y media próxima, hasta los 75 metros, otra al SO en profundidades superiores a los 500 metros, ambas en substratos arenosos y la tercera en la plataforma media entre los 100 y 200 metros en substratos fangosos y areno-fangosos.

Elphidium crispum (Linneo). Lámina II, Fig. 7a-7b.

1758 *Nautilus crispum* Linneo: 709.

1991 *Elphidium crispum* (Linneo) -Cimerman y Langer: 77, lám. 90, fígs. 1-4.

Descripción: Concha grande para su género, lenticular-biconvexa, planispiralada involuta y biumbonada, con el margen periférico de angular a subagudo y con una gruesa quilla. De 22-25 cámaras alargadas y estrechas en la vuelta final que presentan procesos de rectación hasta las 2/3 partes de cada cámara. Suturas intercamerales curvadas, conectadas por gruesos puentes dándole a la concha un aspecto de roseta. Pared finamente granular excepto en la región central circular, umbonada, prominente, con la superficie lisa provista de 10 a 12 pequeños hoyuelos. Abertura a lo largo de la base de la última cámara, también poseen aberturas que forman series de poros interiomarginales.-Tamaño: De 0,8 a 1,8 mm.

Distribución: En el litoral ibérico abunda en áreas litorales de las costas gallegas (Colom, 1974), entre Motril y Nerja (Sánchez-Ariza, 1979) y en la plataforma continental interna portuguesa (Lévy et al, 1995). En la zona de estudio (Fig. 14) se ha localizado en varias áreas situadas preferentemente en el sector Sur, una ocupa casi toda la Bahía externa y la plataforma interna próxima hasta los 30 metros, otra al SE desde los 20 a los 100 metros, la tercera en el centro, sobre el veril de los 100 metros. El área de mayor concentración se encuentra al SO en

profundidades superiores a los 500 metros, en todos los casos en substratos fundamentalmente arenosos.

Elphidium coplanatum (d'Orbigny). Lámina II, Fig. 8a-8b.

1839 *Polystomella coplanata* d'Orbigny: 129, lám. 2, figs. 35-36.

1993 *Elphidium coplanatum* (d'Orbigny) -Sgarrella y Montcharmont-Zei: 228, lám. 20, figs. 9-10.

Descripción: Concha plana con las cámaras dispuestas en una espiral muy desenvuelta y el margen periférico con una estrecha quilla. De 13 a 15 cámaras alargadas y estrechas en la vuelta final que incrementan regularmente de tamaño, presentan procesos de rectación del tamaño del ancho de la cámara que ocupan la totalidad de cada una. Suturas intercamerales muy curvadas con puentes retrales entre ellas. Tamaño: De 0,30 a 0,85 mm.

Distribución: En el litoral ibérico ha sido citada en las costas gallegas (Colom, 1974) y en el litoral Motril-Nerja (Sánchez-Ariza, 1979), en la zona de estudio (Fig. 15) se halla distribuida principalmente por un amplia área que se extiende por todo el sector Sur y por el dominio infralitoral hasta el Norte aunque también se han encontrado ejemplares sobre el veril de los 100 metros en el centro y en el interior de la Bahía en substratos de distinta naturaleza.

Análisis y discusión.

De las 170 especies de foraminíferos bentónicos recientes encontrados en la zona de estudio (Villanueva Guimerans, 1994) solamente 6 corresponden a la Superfamilia Discorbacea y 7 a Rotaliacea. En la Superfamilia Discorbacea estas 6 especies representan cuantitativamente el 6,4% de la totalidad de los foraminíferos bentónicos de la zona. *Cancris auriculatus* al igual que en otras zonas atlánticas, es una especie de plataforma asociada a sedimentos de tamaño de grano medio, *Valvulineria bradyana* es de las más abundantes en profundidades menores a 200 metros y se asocia a sedimentos de tamaño fino coincidiendo con distribuciones de otras zonas similares, tanto atlánticas como mediterráneas, *Eponides concameratus* es aquí esencialmente infralitoral y de plataforma interna asociada a substratos finos en profundidades ligeramente inferiores a otras zonas atlánticas, *Gavelinopsis praegeri* se asocia a sedimentos de tamaño de grano medio alto con el óptimo en el dominio infralitoral, *Rosalina globularis* presenta una distribución similar a la encontrada en las costas portuguesas, de aguas someras en substratos arenosos y *Sphaeroidina bulloides* se encuentra preferentemente en áreas profundas en sedimentos de tamaño de grano medio-fino al igual que en otras zonas tanto atlánticas como mediterráneas.

En la Superfamilia Rotaliacea, las 7 especies encontradas representan cuantitativamente el 21,5% del total de los foraminíferos bentónicos de la zona, *Ammonia beccarii* y en menor medida la var. *inflata*, son abundantes fundamentalmente en el dominio infralitoral y plataforma interna en substratos fangosos ricos en materia orgánica, *Criboelphidium vadeszens* y *Criboelphidium cuvilleri* se encuentran también preferentemente en el dominio infralitoral y de plataforma interna, *Elphidium crispum* y *Elphidium macellum* presentan amplios márgenes batimétricos fundamentalmente en substratos de tamaño de grano medio, *Elphidium coplanatum* en áreas fangosas y *Elphidium advenum* en sedimentos de pequeño tamaño de grano del dominio infralitoral y plataforma interna.

Como se indicó anteriormente, se ha seguido de forma estricta la clasificación genérica de Loeblich y Tappan (1988), utilizada de forma generalizada en la mayoría de los estudios de foraminíferos, debe resaltarse sin embargo, que los criterios adoptados en esta obra para la separación de algunos taxones son de dudosa fiabilidad, sobre todo los referentes a aquellos grupos que presentan gran similitud morfológica y por lo tanto difícil caracterización taxonómica entre las que se encuentran estas dos Superfamilias.

En la citada clasificación, los Discorbaceos aparecen como un grupo excesivamente heterogéneo a los que se asignan entre otras, las Familias Rosalinidae que posee el ombligo abierto y Eponidae con el ombligo cerrado ya que en los criterios seguidos para la similitud y discriminación de caracteres, la disposición umbilical tienen menor peso que la porosidad de la pared. En una interpretación más amplia Hansen y Revets (1992) elevan a esta última a la categoría de Superfamilia (Eponidacea) en base a la ausencia de estructuras internas, incluyendo en ella no solo la Familia Eponidae sino también la Rosalinidae, aunque en el mismo trabajo ponen de manifiesto la posibilidad de que la determinación de esta Superfamilia sea incorrecta debido al descubrimiento posterior por parte de Hottinger et al (1991) de estructuras internas en las especies del género Eponides. El criterio de la porosidad de la pared se sigue también para separar a la Familia Bagginidae, considerarla sinónima de Cancrisidae y Valvulinidae y reunir en ella a los géneros Valvulinaria, Baggina y Cancris que presentan sin embargo diferentes características umbilicales, aunque en este trabajo no se encontró ningún ejemplar del género Baggina, parecería más lógico asignar al género Cancris a la Familia Cancrisidae independiente de Bagginidae ya que el ombligo de Cancris es primariamente abierto pero se obstruye secundariamente por el desarrollo de las expansiones umbilicales que se extienden sobre el ombligo sin cierre umbilical ya que se puede acceder a las primeras cámaras por las aberturas umbilicales relicticas.

Hopker (1956) en la creación de la Familia Gavellinidae incluye entre sus géneros a Gavelinopsis, según Hensen y Revets (óp. cit) un

Rosalinido sin relación con los Gavellinidos, y los relacionada con el género *Valvulineria* aunque siguiendo a Brotzen (1942) lo clasifica dentro de la Familia *Valvulineriidae*, sin embargo recientemente Revets (1996) reclasifica más coherentemente a *Valvulineria* según la presencia de placas y aberturas umbilicales relícticas como un *Cancrisido*.

Lévy et al., (1984) en un estudio morfoestructural de los géneros *Discorbis*, *Ammonia*, *Rotalia* y *Pseudoeponides* considerando como caracteres morfológicos los pares próximos, el folium y la longitud foliar los agrupan en la Familia *Rotaliidae* cuestionando la existencia de la Superfamilia *Discorbacea*, posteriormente Lévy et al., (1986) devuelven al género *Rotalia* a los *Discorbaceos* puesto que en la Familia *Rotaliidae* los lóbulos umbilicales coalescen con una placa umbilical que los cubren similar que en el género *Discorbis*, aunque en el adulto esta cubierta se rompe por el crecimiento y se abren canales suturales por reabsorción lo que no ocurre en *Discorbis*. El género *Ammonia* es más complejo en organización que *Rotalia* y *Discorbis* es desde el punto de vista estructural intermedio entre ambos, Hansen y Revets (op. cit) proponen una terminología nueva para estos grupos según la cual la especie tipo de *Discorbis* es transferida de nuevo a *Rotaliidae* causando sinonimias entre *Discorbidae* y *Rotaliidae*.

Otro género muy problemático, asignado en la mayoría de las clasificaciones a la Superfamilia *Buliminacea*, pero que en la clasificación de Loeblich y Tappan (op. cit.) aparece en la *Discorbaceae* es *Sphaeriodina*, originario del Eoceno probablemente por evolución del género planctónico *Pulleina*, al añadirse las últimas cámaras en principio con enrollamiento planispiralado y que posteriormente por cambio de los ejes se hace más irregular y se comprime, la situación de la apertura en relación con las primeras cámaras y las suturas son variables y aunque pueden cambiar la apariencia del individuo, no tienen realmente importancia taxonómica, el hecho de que solo en algunos casos la apertura se encuentre cerca de las primeras cámaras los ha situado cerca de los *Rotaliformes* y de los *Bagginidos*, no obstante, la gran variabilidad que presenta, hace necesaria una revisión profunda de holotipos y paratipos para encuadrarlo convenientemente.

También se incluye en la Superfamilia *Rotaliaceae* a *Elphidae*, un grupo primariamente planispiralado, quizás habría que contemplar la posibilidad de situarlo de forma más apropiada en *Nonionacea*, concretamente como formas gradacionales hacia *Nonionidae* teniendo en cuenta la estructura y morfología de la pared y los canales rectales.

En general, aunque entre otros, con los matices anteriormente expuestos, puede decirse que la taxonomía de los *Rotaliaceos* esta bien definida y la mayoría de los géneros que la componen bien situados a diferencia de lo que ocurre con los *Discorbaceos* que se presentan como excesivamente heterogeneos en el que no están bien representados por la especie tipo algunos taxones y algunos de sus géneros probablemente erróneamente asignados, sin embargo aunque su filiación no esta muy

clara, para la estabilidad taxonómica parece justificado retener entre otros en su seno a la problemática Familia Rotaliidae porque una nueva reubicación podría causar incluso la desaparición del Suborden Rotaliina en favor de Discorbina.

En el concepto filogenético de "especie" en foraminíferos se utilizan como criterios diferenciales, la adaptación selectiva a unas condiciones ambientales en este caso fundamentalmente las características oceanográficas y físico-químicas del sedimento, la constitución morfológica de los ejemplares y la relación espacio-temporal de los mismos, considerándose que el colectivo polimórfico que producirá una adaptación selectiva constituye un "spectrum" (Mateu, 1981) con connotaciones en las biofácies y tanatofácies. A pesar de las implicaciones ecológicas de estos criterios, en muchos casos la información obtenida a partir de la simple distribución de especies es muy limitada, siendo necesaria la aplicación de métodos de Análisis Multivariante al tratamiento de datos que produzca una descripción cuantitativa de la fauna, resuelva problemas como la clasificación y agrupamiento de las muestras y ayude a conocer la estructura interna de los grupos (Ujii y Kusukawa, 1969; Jöreskog et al., 1976) este tipo de análisis es sensible a las condiciones medioambientales y se utiliza asiduamente en trabajos foraminiferosológicos para la determinación de las tanatofacies y tanatocenosis (Buzas, 1969).

A partir de la frecuencia relativa de cada especie en cada una de estas dos Superfamilias se procedió por separado al análisis por Componentes Principales en Modo-Q (Factorial inverso) con rotación Varimax para delimitar las tanatofacies de cada una de ellas con los Factors Loadings superiores a 0.75 (Williamson et al., 1984).

Para la determinación de las tanatofacies de los Discorbaceos se han seleccionado los Factor Loadings que justificasen en total sobre el 70 % de la varianza explicada, concretamente en este caso F1+ F2 justifican el 74 % de la misma (Tabla 1A). En la figura 16 se observa la distribución irregular de esta tanatofacies, encontrándose dispersa en tres áreas, dos situadas en la plataforma interna en substratos de distinta naturaleza y la tercera en la plataforma externa y talud en substratos arenosos y fangosos, las especies determinantes de las asociaciones F1 y F2 son *Valvulinaria bradyana* y *Gavelinopsis praegeri* (Tabla 1 B). Aunque el resultado de estos análisis no es directamente extrapolable, se observa en este caso una cierta heterogeneidad en el grupo en consonancia con la taxonomía de los mismos.

A diferencia de la anterior, la tanatofacies correspondiente a los Rotaliaceos presenta una distribución regular y homogénea (Fig. 17) en consonancia en cierto modo con su integridad taxonómica. La F1 determina la principal asociación (Tabla 2 A) que justifica por si misma más del 70 % de la varianza explicada (73 %) siendo la especie determinante de esta asociación *Ammonia beccarii* asociada positivamente *Elphidium advenum* y negativamente las demás (Tabla 2 B),

que se considera típica de áreas litorales, generalizada tanto en el Atlántico como en el Mediterráneo (Murray, 1991), la distribución de los Factor Loadings de la F1 (Fig. 17) muestra la relación de esta asociación con substratos fangosos claramente coincidentes con la cuña sedimentaria progradante de materiales finos proveniente fundamentalmente de la desembocadura del Guadalquivir, desviados debido a la acción de la corriente de Agua Central Noratlántica que cubre los depósitos arenosos del intervalo transgresivo previo (Fig. 2).

Bibliografía.

BOLTOVSKOY, E., G. GIUSSANI, S. WATENABE y R. WRIGTH.-1980. Atlas of benthic shelf foraminifera of the South West Atlantic. Dr. W Junk by Publishers. The Hague-Boston-London, 147 pp.

BROTZEN, F.-1942. Dier Foraminiferengattung Gavelinella nov. gen. und die Systematik der Rotaliiformes: Arsbok Sveriges Geologiska Undersökning, 36: 1-60.

BUZAS, M.A.-1969. On the Quantification of Biofacies. Proceedings of North American Paleontological Convention. Part. B: 101-116.

BUZAS, M.A.-1990. Another look at confidence limits for species proportions. Jour. Paleont., 65(5): 842-843.

CEARRETA, A.-1989. Foraminiferal assemblages in the Ría of San Vicente de la Barquera (Cantabria, Spain). Rev. Española de Micropaleont, 30(1): 67-80.

CIMERMAN, F y M. R. LANGER.-1991. Mediterranean Foraminifera. Slovenska Akademija Znanosti in Umetnosti. Classis IV: Historia Naturalis, 30: 295 pp.

COLOM, G.-1974. Foraminíferos Ibéricos. Introducción al estudio de las especies bentónicas recientes. Investigación Pesquera, 38 (1): 245 pp.

CUSHMAN, J. A.-1922. Shallow water Foraminifera from the Tortugas region. Publications Carnegie Institution Washington. 17: 1-85.

CUSHMAN, J. A y P. BRÖNNIMANN.-1948. Some new genera and species of foraminifera from brackish water of Trinidad, Contribution from the Cushman Laboratory for Foraminiferal Research, 24: 15-21.

d'ORBIGNY, A.-1826 Tableau méthodique de la classe des Céphalopodes: Annales des Sciences Naturelles, 7: 245-314.

- d'ORBIGNY, A.-1839. Foraminifères. In P. Barker-Webb & S. Berthelot, *Histoire Naturelle des Iles Canaries*, 2 (2), Zool. Paris: Bethane: 119-146.
- FITCHELL, L y J. P. C. MOLL.-1798. *Testacea microscopica, aliaque minuta ex generibus Argonauta et Nautilus, ad naturam picta et descripta*. Camesina (Wien): 123 pp.
- FORNASINI, C.-1900. Intorno ad alcuni esemplari di foraminiferi Adriatici. *Memorie R. Accad. Sci. Ist. Bologna. Sci. Nat*, 5 (8): 357-402.
- GALHANO, M.H.-1963. Foraminiferos da costa de Portugal (Algarve). *Publ. Facult. Ciencias Porto*, 89: 110 pp.
- GAUDETTE, H.E., W. R. FLIGHT., L. TORNER y D.W. FOLGER.-1974. An inexpensive titration method for determination of organic carbon in recent sediments. *Jour. Sediment. Petrol*, 44: 249-253.
- GUTIÉRREZ, J., F. G. HERNANDEZ MOLINA y F. LOPEZ AGUAYO.-1993. Evolución de la dinámica sedimentaria reciente en la Plataforma continental septentrional del Golfo de Cádiz. *Geogaceta*, 14: 32-35.
- HANSEN, H. J y S. REVETS.-1992. A revision and reclassification of the Discorbidae, Rosalinidae and Rotaliidae. *Jour. Foram. Research*, 22(2): 166-180.
- HAYNES, J.R.-1973. Cardigan Bay Recent Foraminifera (Cruises of the R.V. Antur, 1962-1964). *Bull. British Museum Zoology (Natural History)*. Supplement 4. London: 245 pp.
- HERON-ALLEN, E y A. EARLAND.-1913. Clare Island Survey. Foraminifera: *Proceedings of the Royal Irish Academy*, 31: 1-188.
- HOPKER, J.-1956. Tertiary foraminifera of coastal Ecuador Part II: *Jour. of Paleontology*, 30: 891-958.
- HOTTINGER, L., HALICZ, E y REISS, Z. 1991. *Micropaleontology*, 37: 60-75.
- JÖRESKOG, K. G., KLOVAN, J y REYMENT, R. 1976. *Methods in Geomathematics, I: Geological factos Analysis*: Elsevier, 178 pp.
- LAMARCK, J. B.-1804. Suite des Memories sur les Fossiles des environs de Paris: *Annales du Muséum National d'Histoire Naturelle*, 5: 179-188.
- LEE, J.J.-1989. Granuloreticulosa. En Margulis et al. *Handbook of Proctotista*. Jones y Bartlett. Boston :524-548.

LÉVY, A.-1966. Contribution à l'étude écologique et micropaléontologique de quelques Elphidium (foraminifères) du Roussillon. Description d'une nouvelle espèce: Elphidium cuvilleri n. sp.: Vie et milieu, 17 (1A): 1-8.

LÉVY A., MATHIEU, R. POIGNANT, A., ROSSET, M. -1984. Une nouvelle conception des Familles Discorbidae et Rotaliidae. Benthos '83: 2nd Int. Symp. Benthic Foraminifera: 381-387.

LÉVY A., MATHIEU, R. POIGNANT, A., ROSSET, M.-1986. Discorbidae and Rotaliidae: A classification to be revised: Jour. Foram. Researc. 16: 63-70.

LÉVY A., MATHIEU, R., POIGNANT, A., ROSSET, UBALDO, M. y LEBREIRO, S. -1995. Foraminifères actuels de le marge continentale portugaise.- inventaire et distribution. Mem. Ins. Geol. Min, Lisboa, 32: 3-116.

LINNEO, C.-1758. Systema Naturae, 1. 10 ed. Holminae (Stockholm): L. Salvii.

LOEBLICH, A.R y H. TAPPAN.-1988. Foraminiferal Genera and their Classification. Van Nostrand Reinhold Com., New York : 970 pp.

MATEU, G.-1970. Estudio sistemático y bioecológico de los foraminíferos vivientes de los litorales de Cataluña y Baleares. Trabajo del I.E.O, 38: 85 pp.

MATEU, G.-1981. Problemas e implicaciones del concepto de especie en Micropaleontología. Inst. Estudis Balearics, 2(5): 43-56..

MURRAY, J. W.-1973. Distribution and ecology of living benthic foraminiferes. Heinemann Educational Books. London : 288 pp.

MURRAY, J. W.-1991. Ecology and Paleoecology of recent benthic foraminifera. Longmman Scientific & Technical: 397 pp.

PASCUAL CUEVAS. A.-1984. Los foraminíferos actuales del litoral vizcaino. Kobie (Ser. Paleoantropologia y C. Naturales), 14: 341-350.

REVETS, S. A.-1996. The generic Revision of Five Families of Rotaline Foraminifera. Part. II. Cushman Foundation for Foraminiferal Research. Special Publication, 34: 57-113.

SANCHEZ ARIZA M.C.-1979. Estudio sistemático-ecológico de los foraminíferos recientes de la zona litoral Motril-Nerja. Tesis Doctoral. Publ. Univers. Granada, 211: 212 pp.

SCHÖNFELD J.-1997. The impact of the Mediterranean Outflow Water of benthic foraminiferal assemblages and surface sediments at the southern Portuguese continental margin. *Marine Micropaleontology*, 29: 211-236.

SEGADO, M., GUTIÉRREZ, J., HIDALGO, F., MARTINEZ, J y CEPERO, F.-1984. Estudio de los sedimentos recientes de la plataforma continental gaditana entre Chipiona y cabo Roche. *Bol. Geol. Min*, 95: 310-324.

SEGUENZA, G.-1862. Dei terreni Terziarii del distretto di Messina, Parte II. Mesina. T Capra, 1-84.

SGARRELLA, F y M.Z. MONCHARMONT-ZEI.-1993. Benthic Foraminifera of the Gulf of Naples (Italy): systematics and autoecology. *Bolletino de la Società Paleontologica Italiana*, 32(2): 145-264.

UBALDO, M. L y M.R.P. OTERO.-1978. Foraminíferos da costa su-sudoeste de Portugal. *Ser. Geol. Lisboa*, 2: 77-130.

UJIE, H y T. KUSUKAWA.-1969. Analysis of Foraminiferal Assemblages from Miyako and Yamada Bays, Northeastern Japan. *Bull. Nat. Science Museum. Tokyo*. 12(3): 735-772.

VILLANUEVA GUIMERANS, P.-1994. Implicaciones oceanográficas de los foraminíferos bentónicos recientes en la Bahía y plataforma continental gaditana. *Taxonomía y asociaciones*. Tesis doctoral. Univ. Cádiz: 395 pp. Inédita.

VILLANUEVA GUIMERANS, P y J. GUTIÉRREZ.-1994. The hydrodynamics of the Gulf of Cádiz and the exchange of water masses through the Gibraltar strait. *International Hydrographic Review*, 71 (1): 52-65.

VILLANUEVA GUIMERANS, P y M. C. SANCHEZ ARIZA.-1996. Distribución y variabilidad de *Ammonia beccarii* (Linneo) en las costas atlánticas de Cádiz y en el litoral mediterráneo entre Motril y Nerja. España. *Investigaciones de la Biosfera*, 1:21-26.

WHENTWORTH, C. K.-1922. A scale of grade and class terms for a clastic sediments. *Jour. Geol*, 30: 337-392.

WILLIAMSON, M.A., C. E. KEEN y P. J. MUDIE.-1984. Foraminiferal distribution on the continental margin off Nova Scotia. *Marine Micropaleontology*, 9: 219-239.

WILLIAMSON, W. C.-1858. On the Recent Foraminifera of Great Britain. *Roy. Soc. Publs. XX. London*, 107 pp.

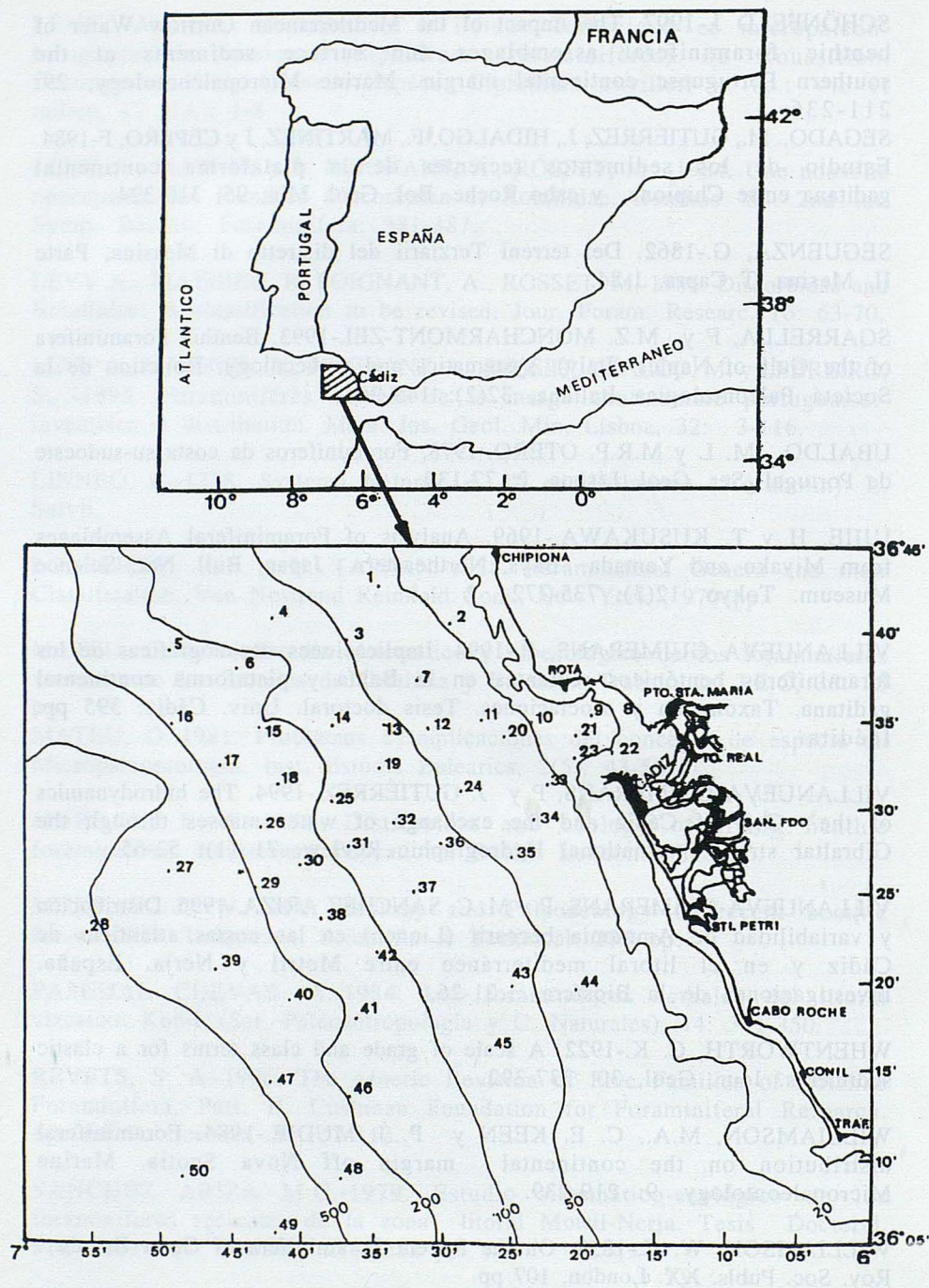


Figura 1.- Localización geográfica de la zona de estudio y situación de las muestras.

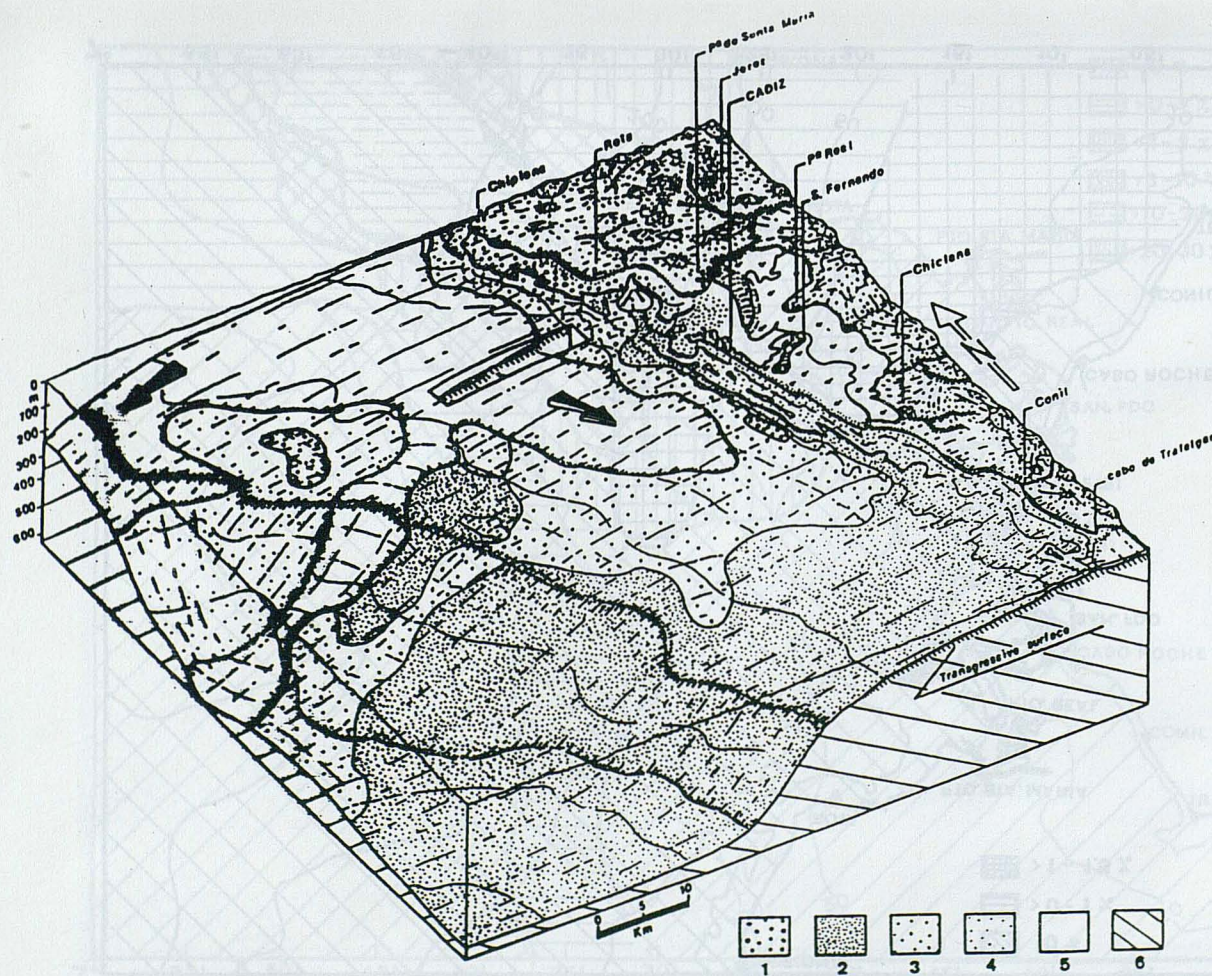


Figura 2.- Evolución de la sedimentación reciente y distribución actual de las facies granulométricas (según GUTIERREZ et al., 1993).

- 1.- gravas. 2.- arenas.
- 3.- arenas fangosas.
- 4.- fango-arenoso. 5.- fango (limo-arcilla) y 6.- materiales pre-Holocenos.

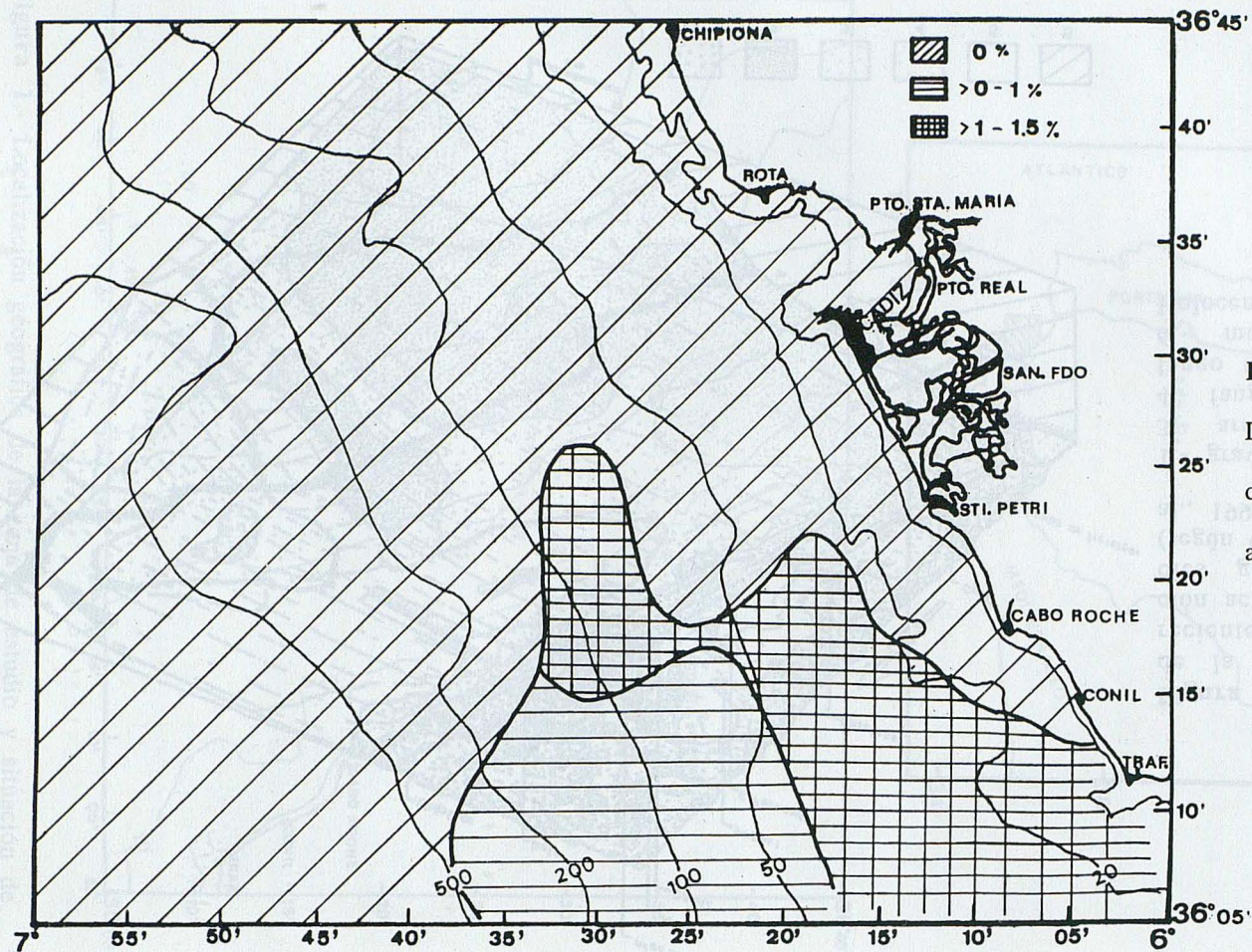


Figura 3.-
Distribución
de *Cancris*
auriculus.

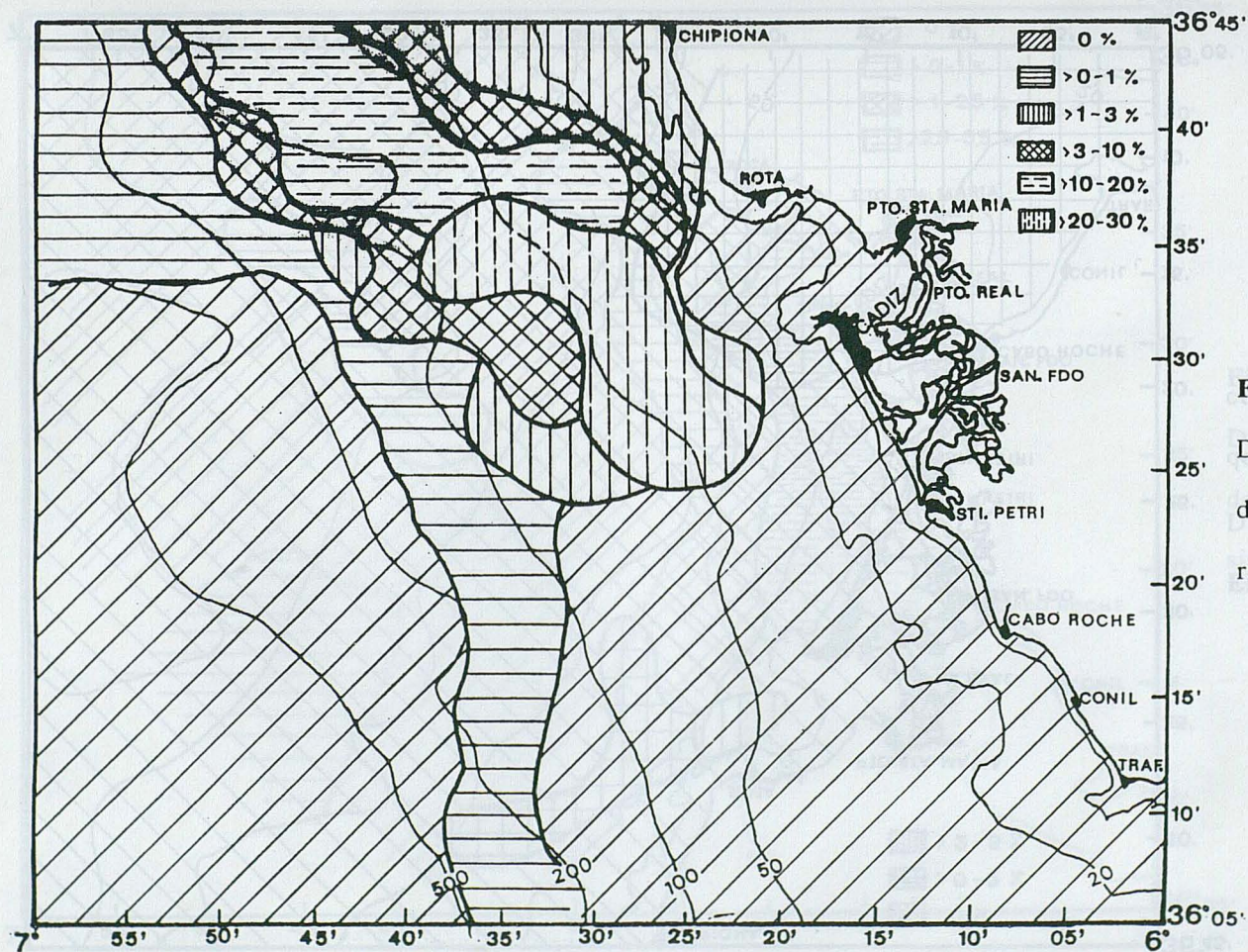


Figura 4.-
Distribución
de *Valvulinaria bradyana*.

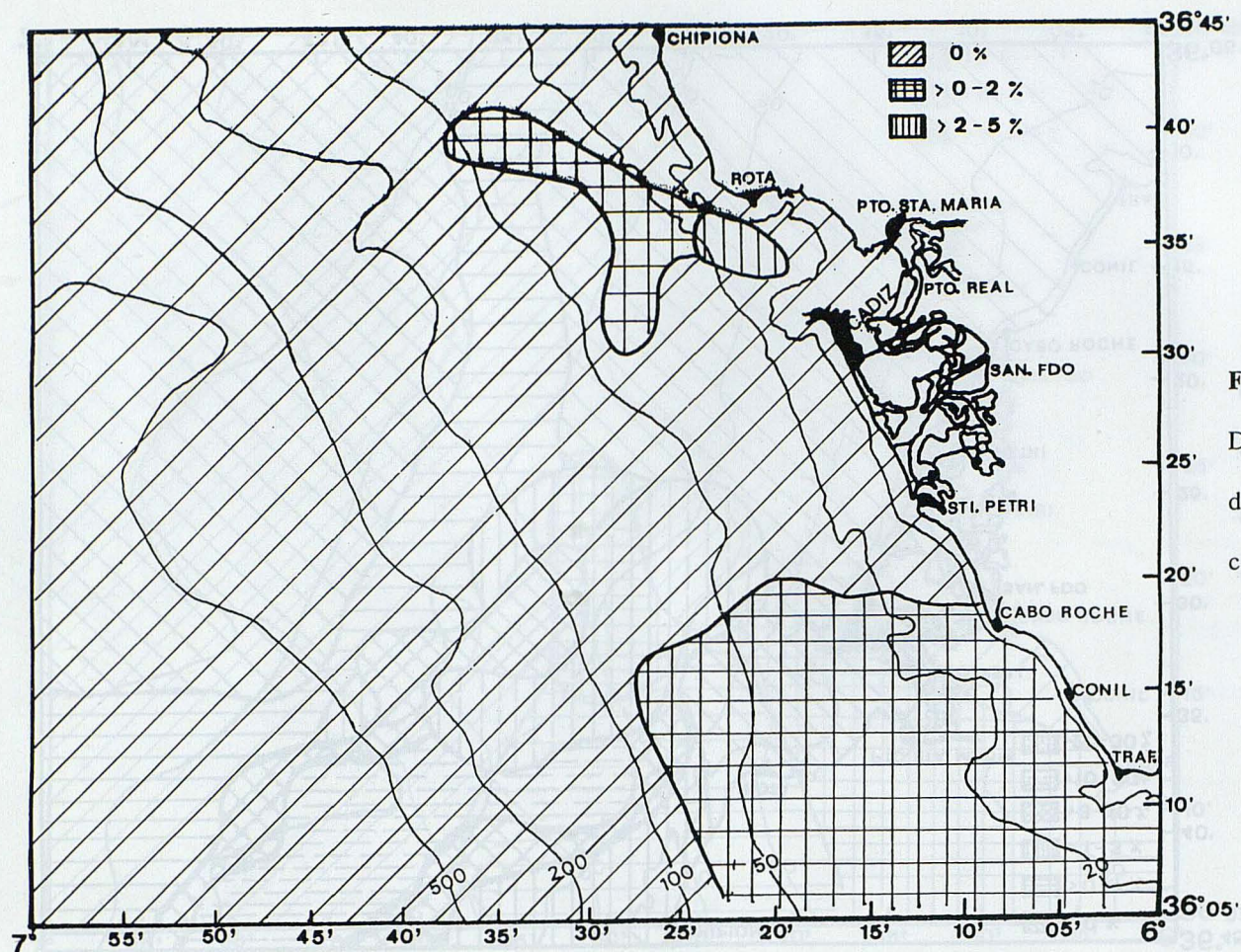


Figura 5.-

Distribución

de Eponides

concameratus.

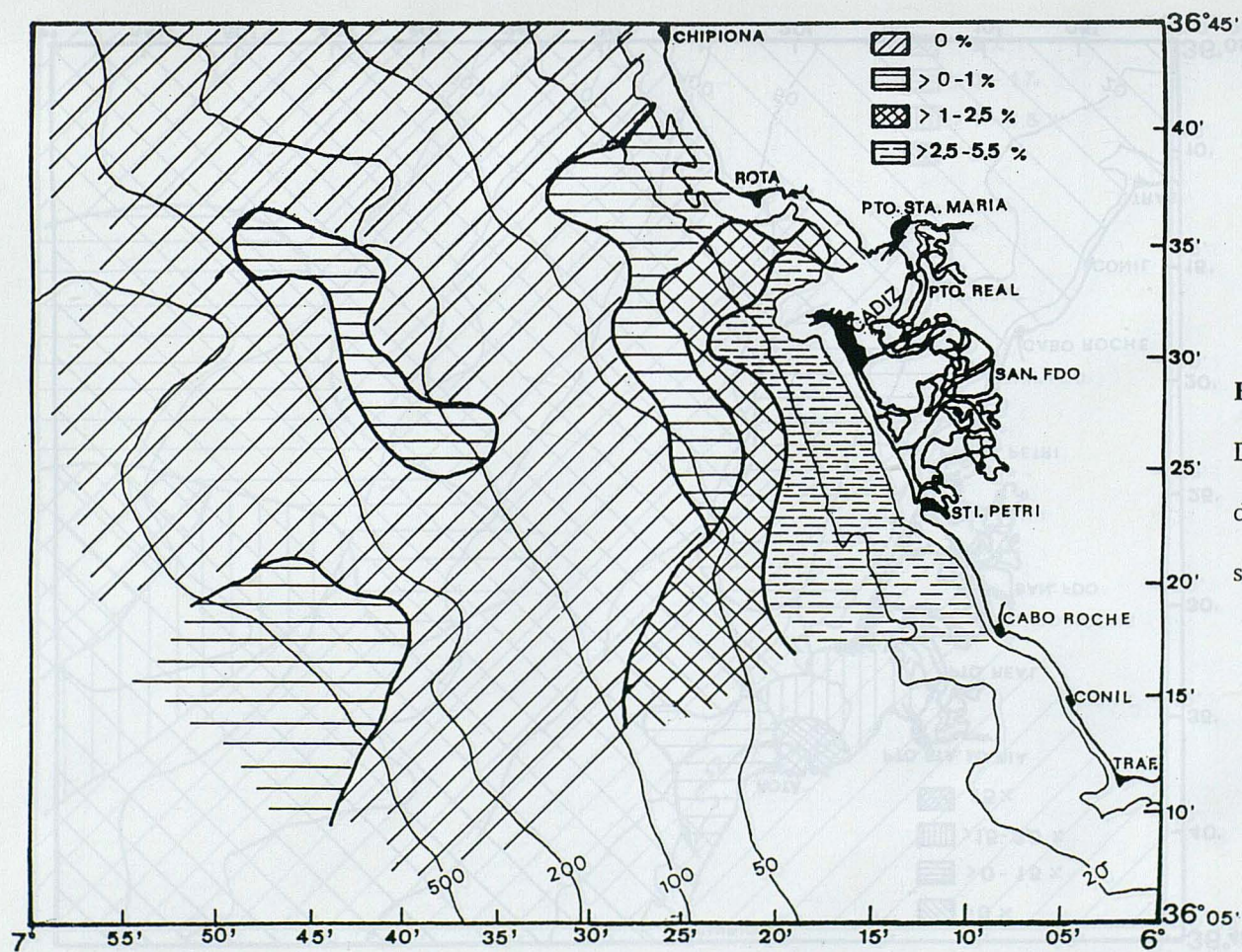


Figura 6.-

Distribución
de *Gavelinop-*
sis praegeri.

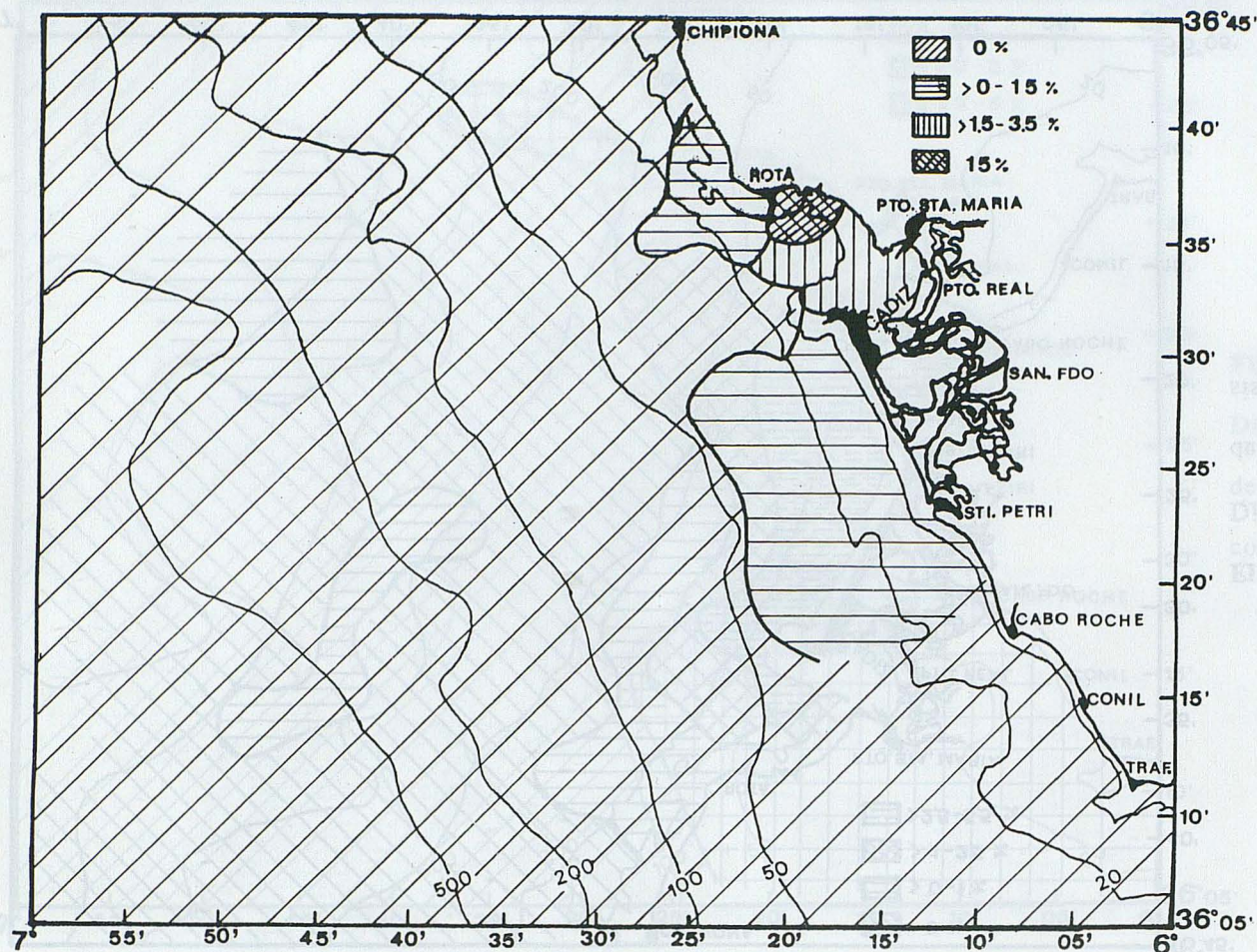


Figura 7.-
Distribución
de *Rosalina*
globularis.

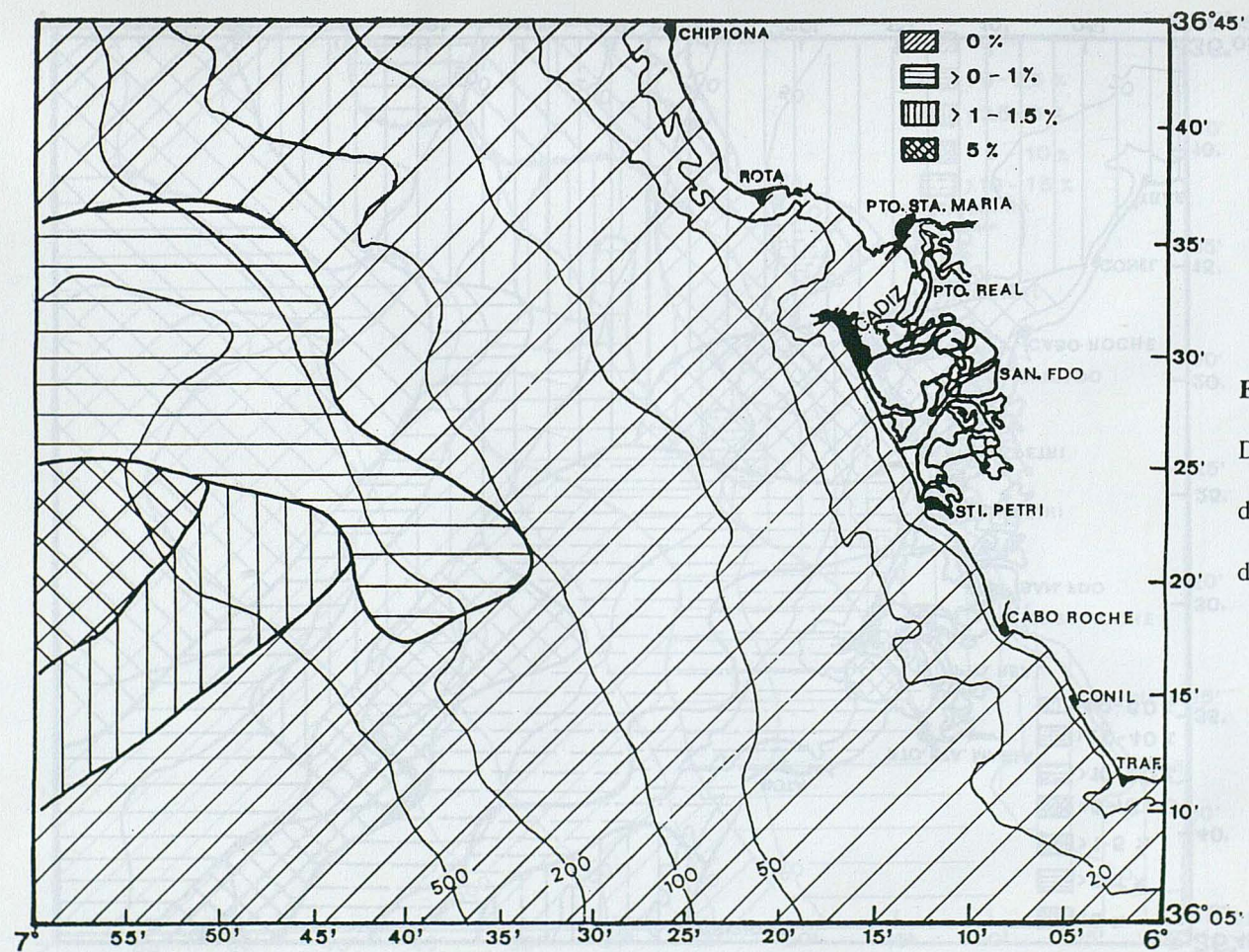


Figura 8.-
Distribución
de *Sphaeroidina bulloides*.

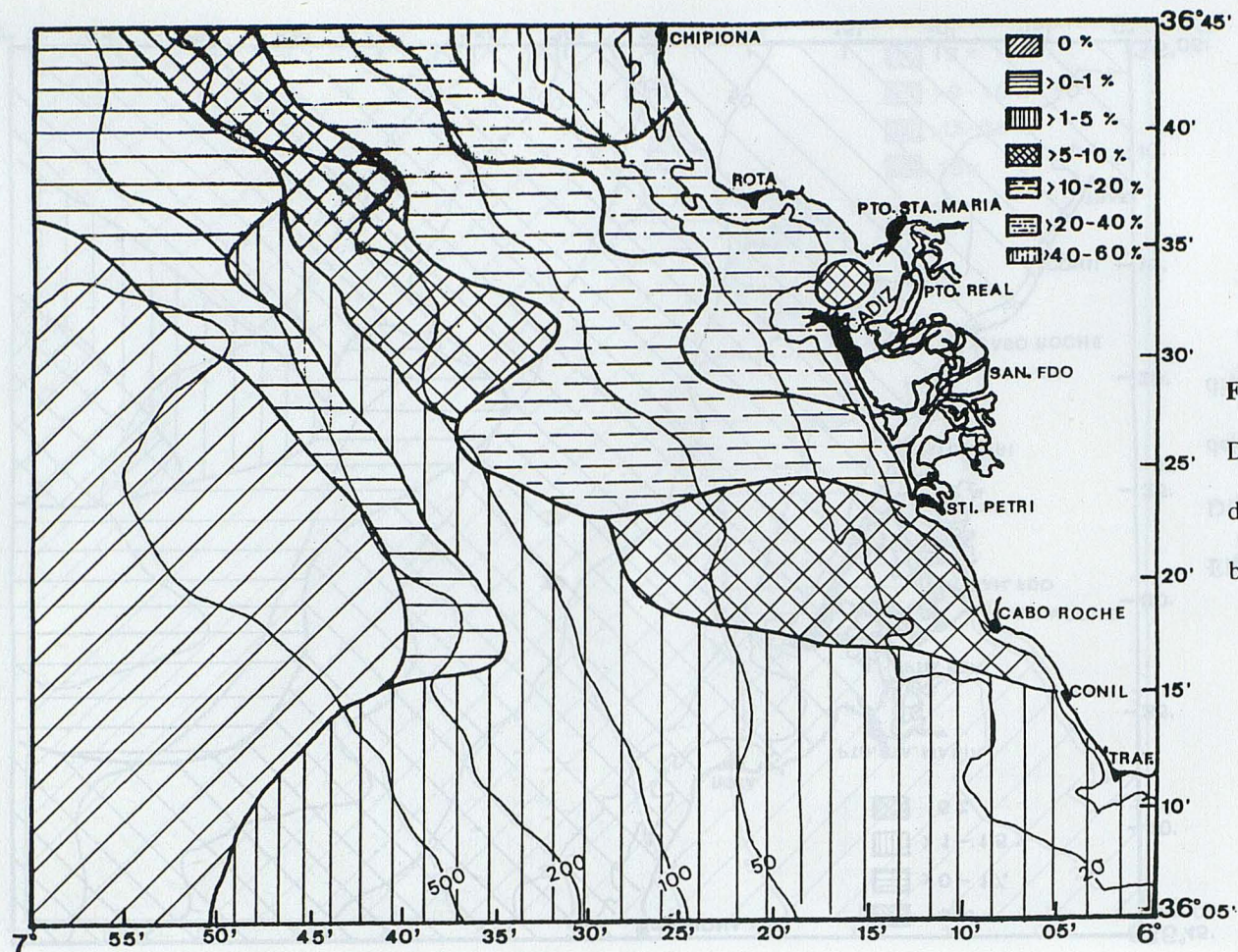


Figura 9.-
Distribución
de *Ammonia*
beccarii.

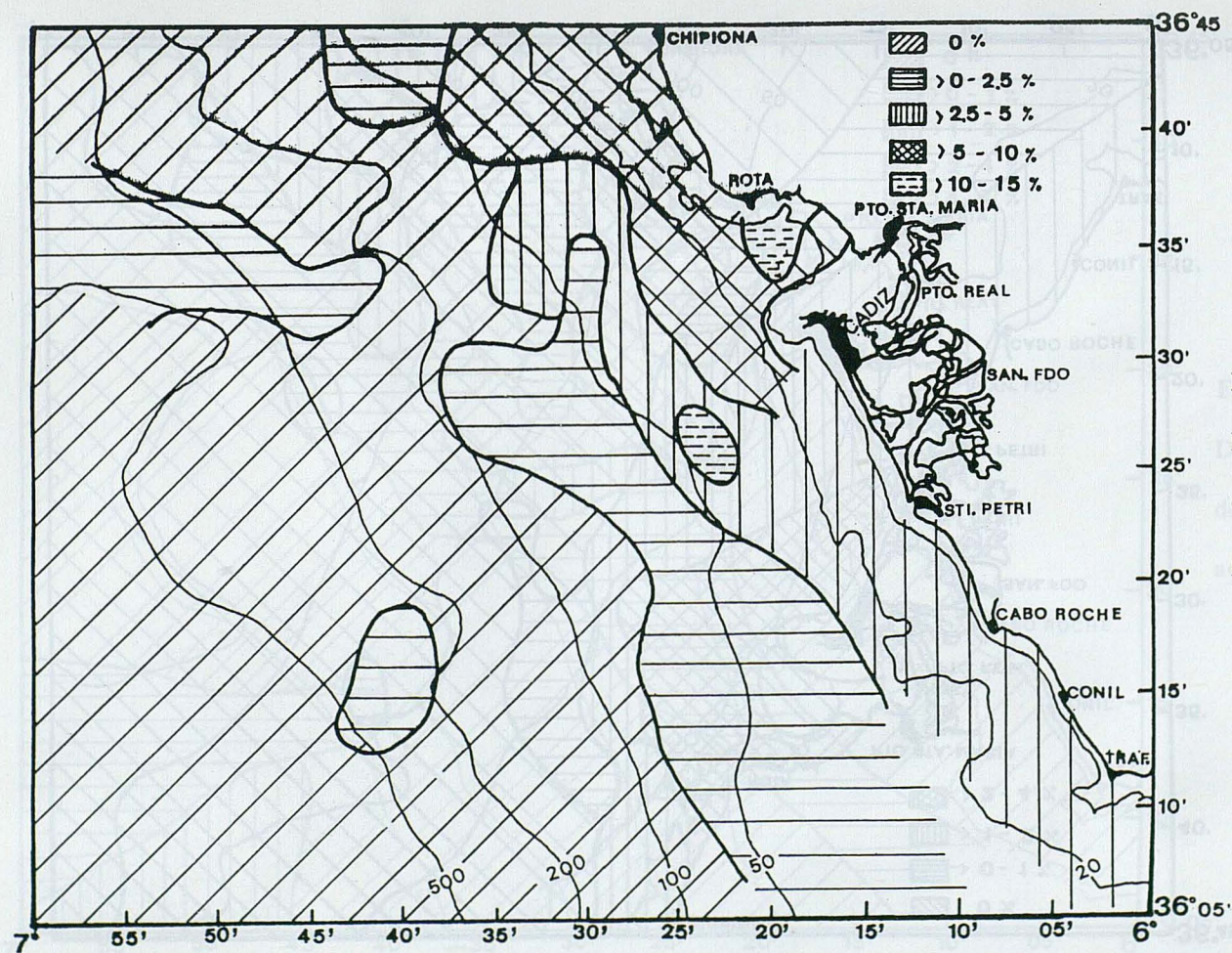


Figura 10.-
Distribución
de *Cribroelphidium*
vadesens.

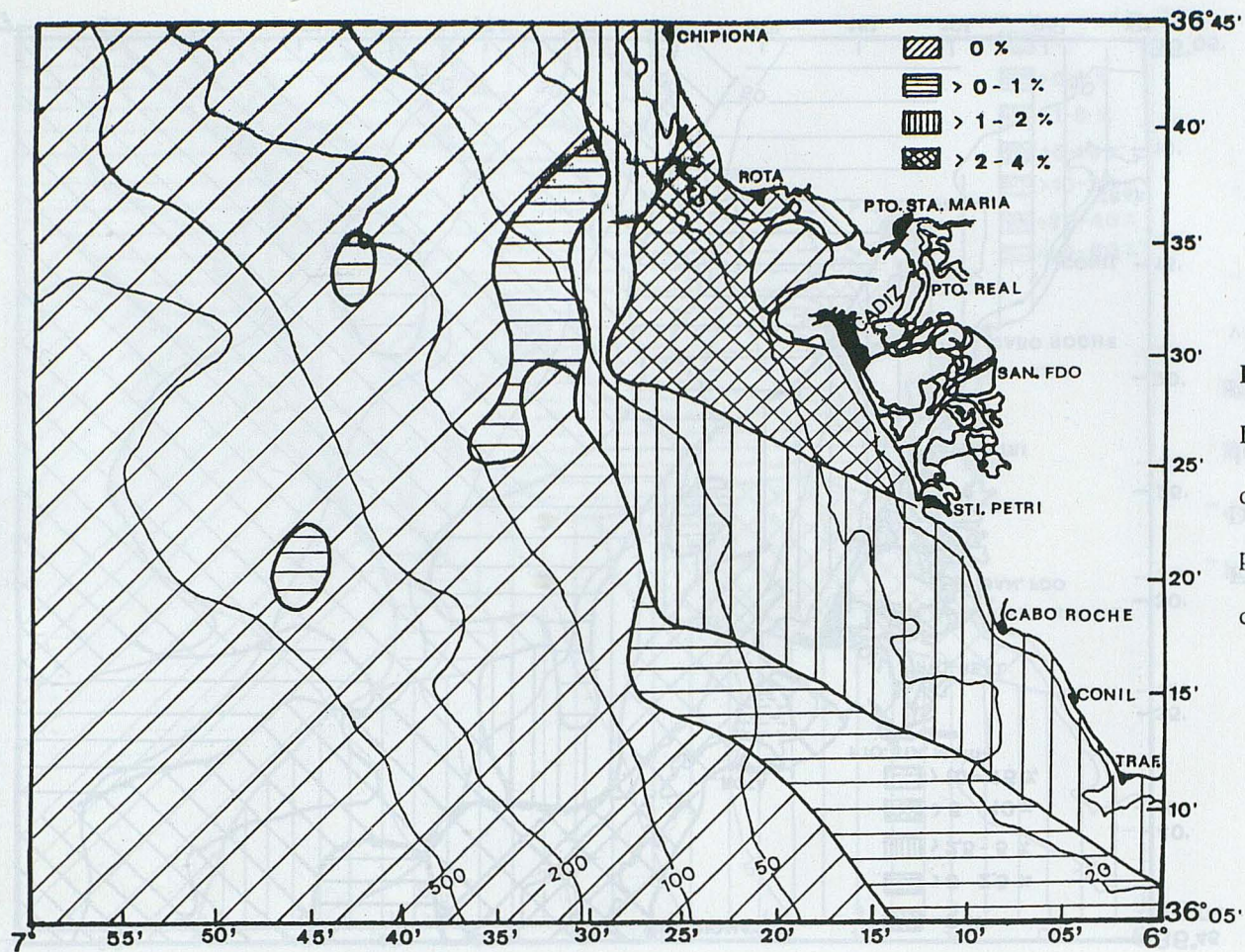


Figura 11.-
Distribución
de *Cribroel-*
phidium
cuvillieri.

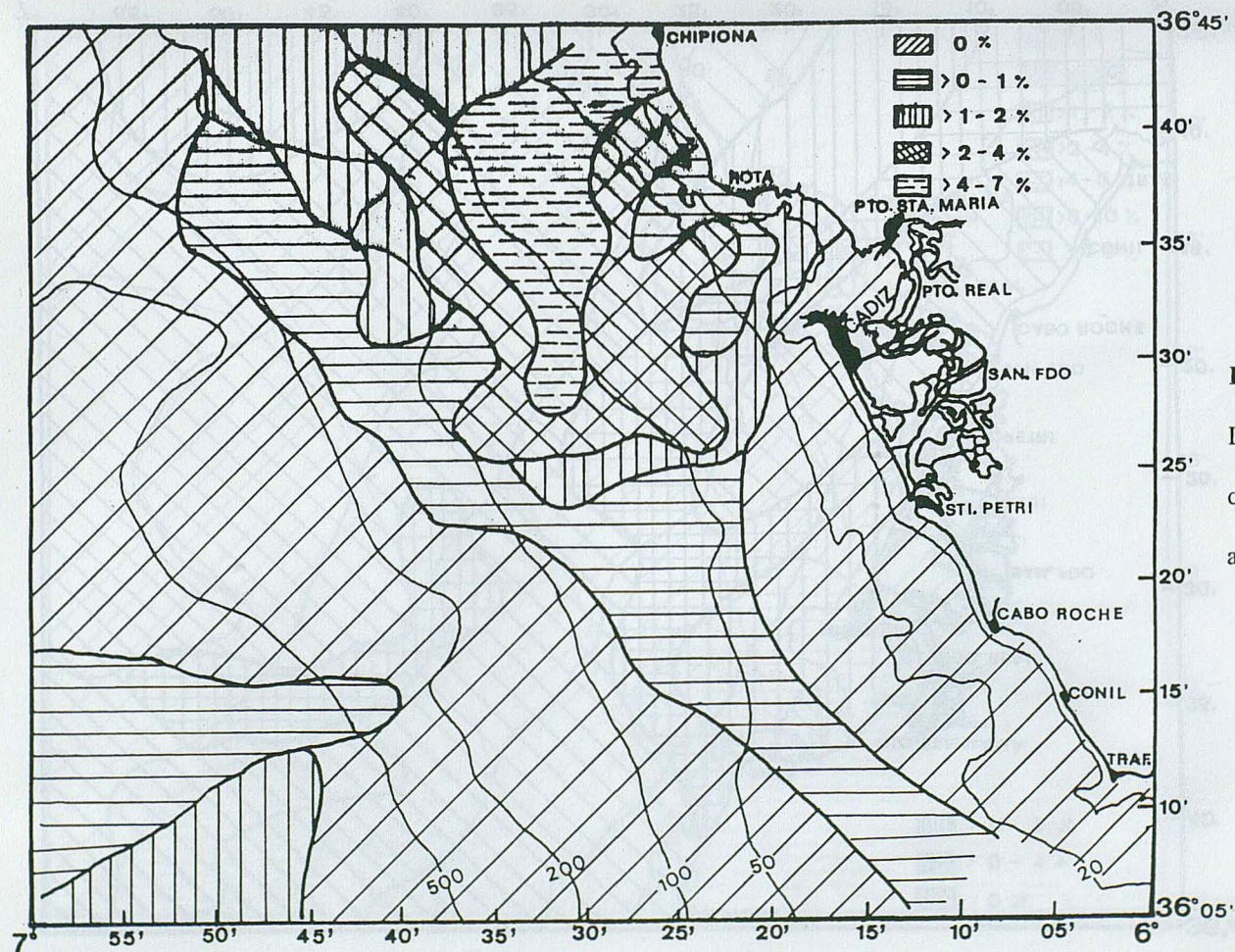


Figura 12.-
Distribución
de *Elphidium*
advenum.

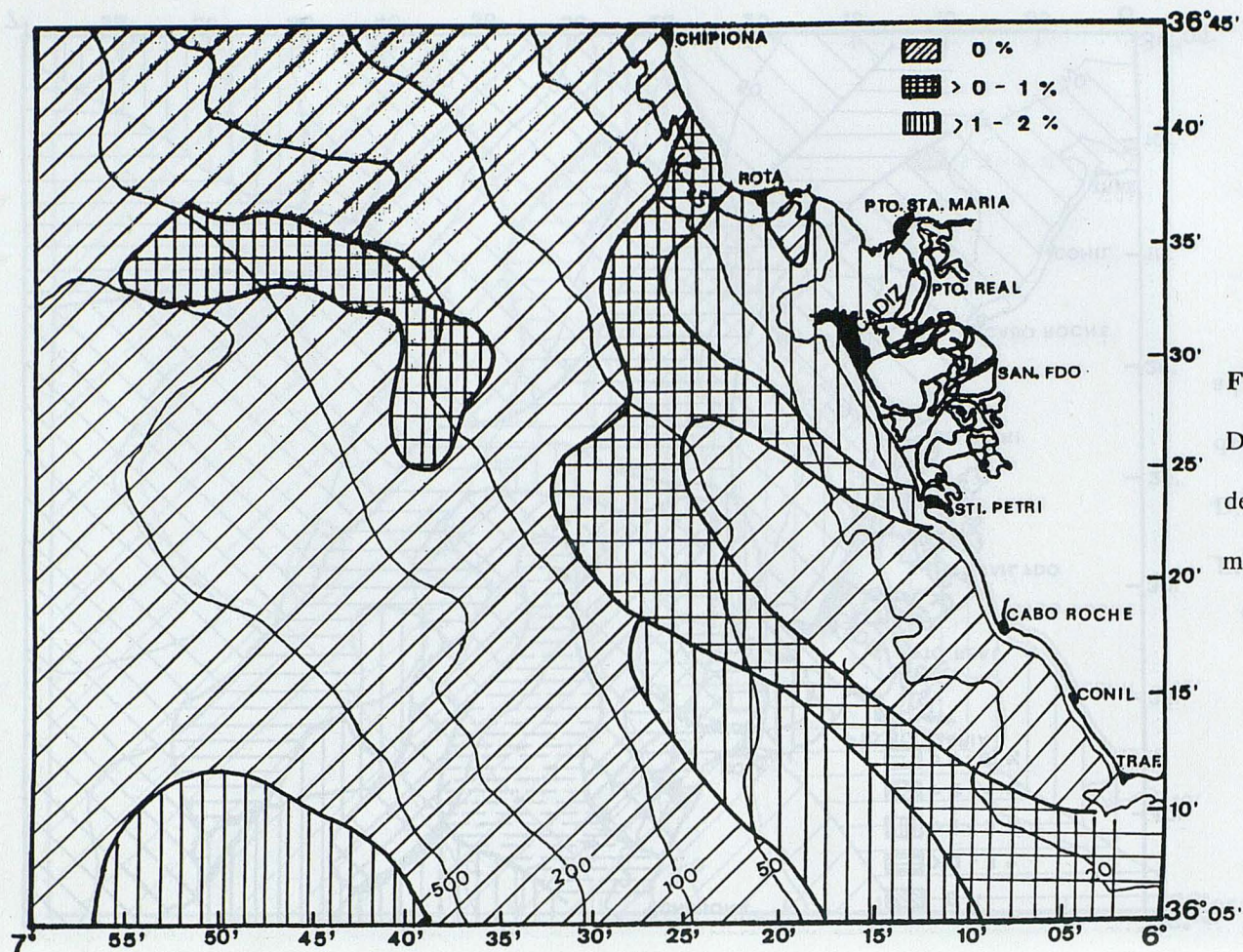


Figura 13.-
Distribución
de *Elphidium*
macellum.

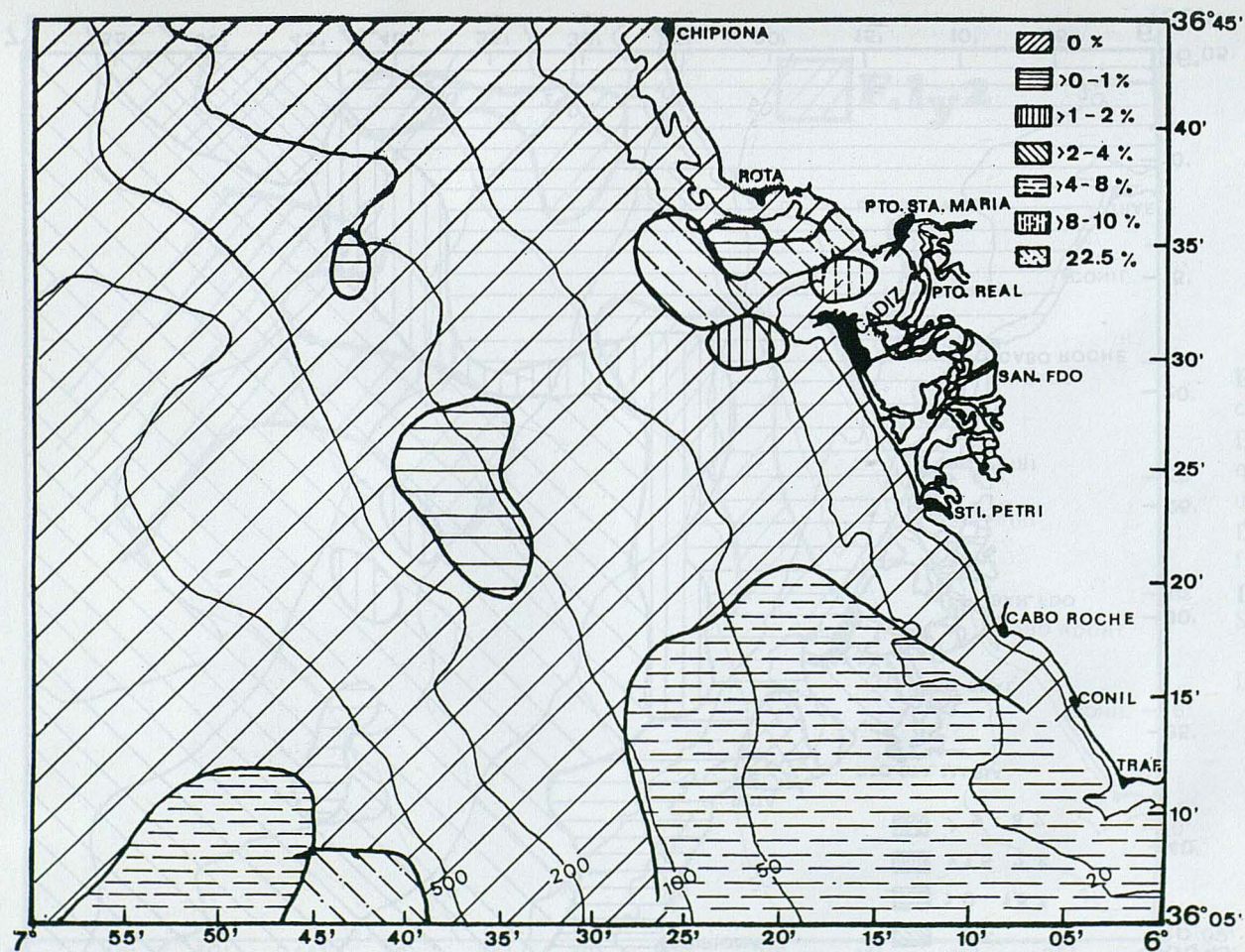


Figura 14.-
Distribución
de *Elphidium*
crispum.

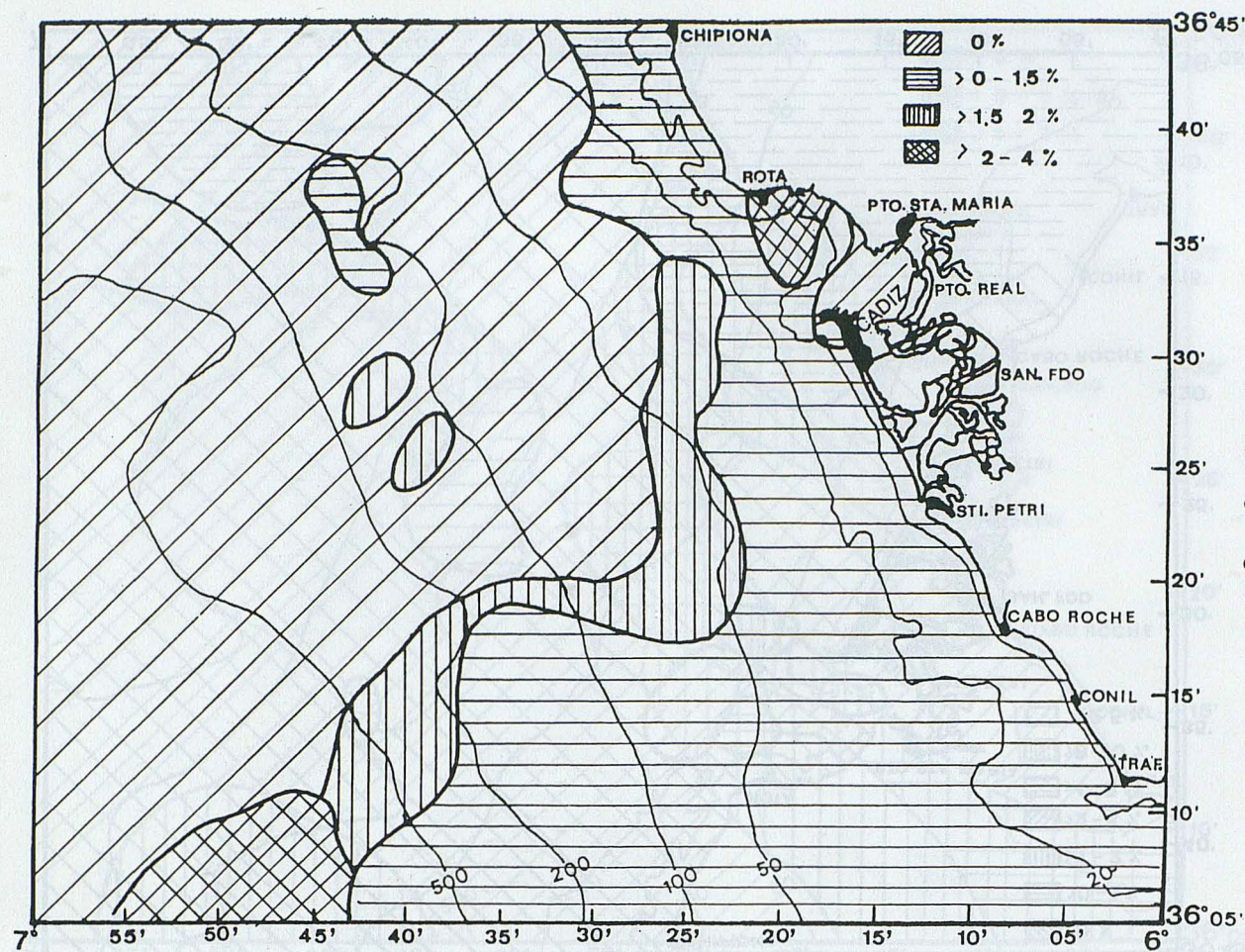


Figura 15.-
Distribución
de *Elphidium*
coplanatum.

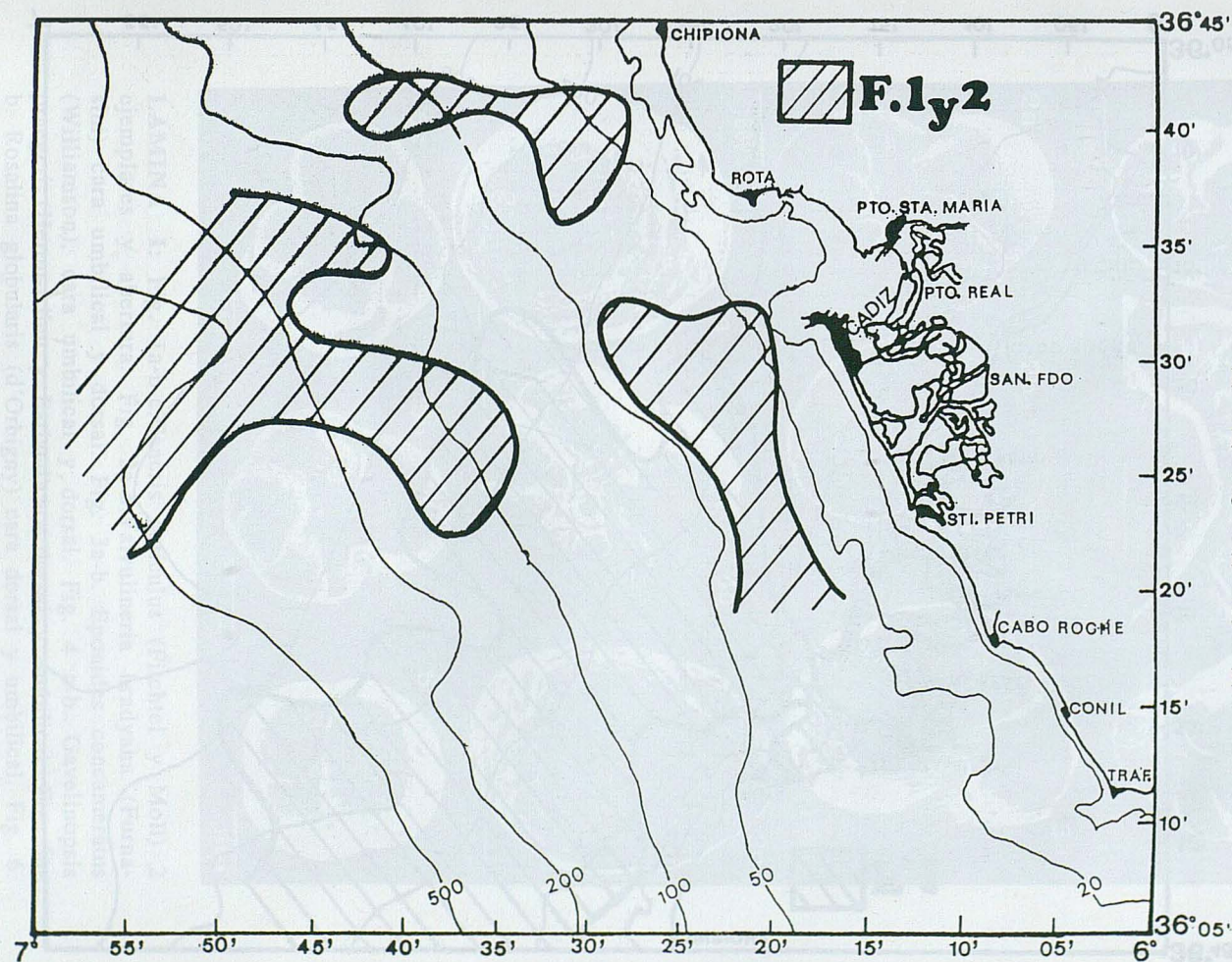


Figura 16.-
Distribución
de las tanato-
facies de la
Superfamilia
Discorbacea.

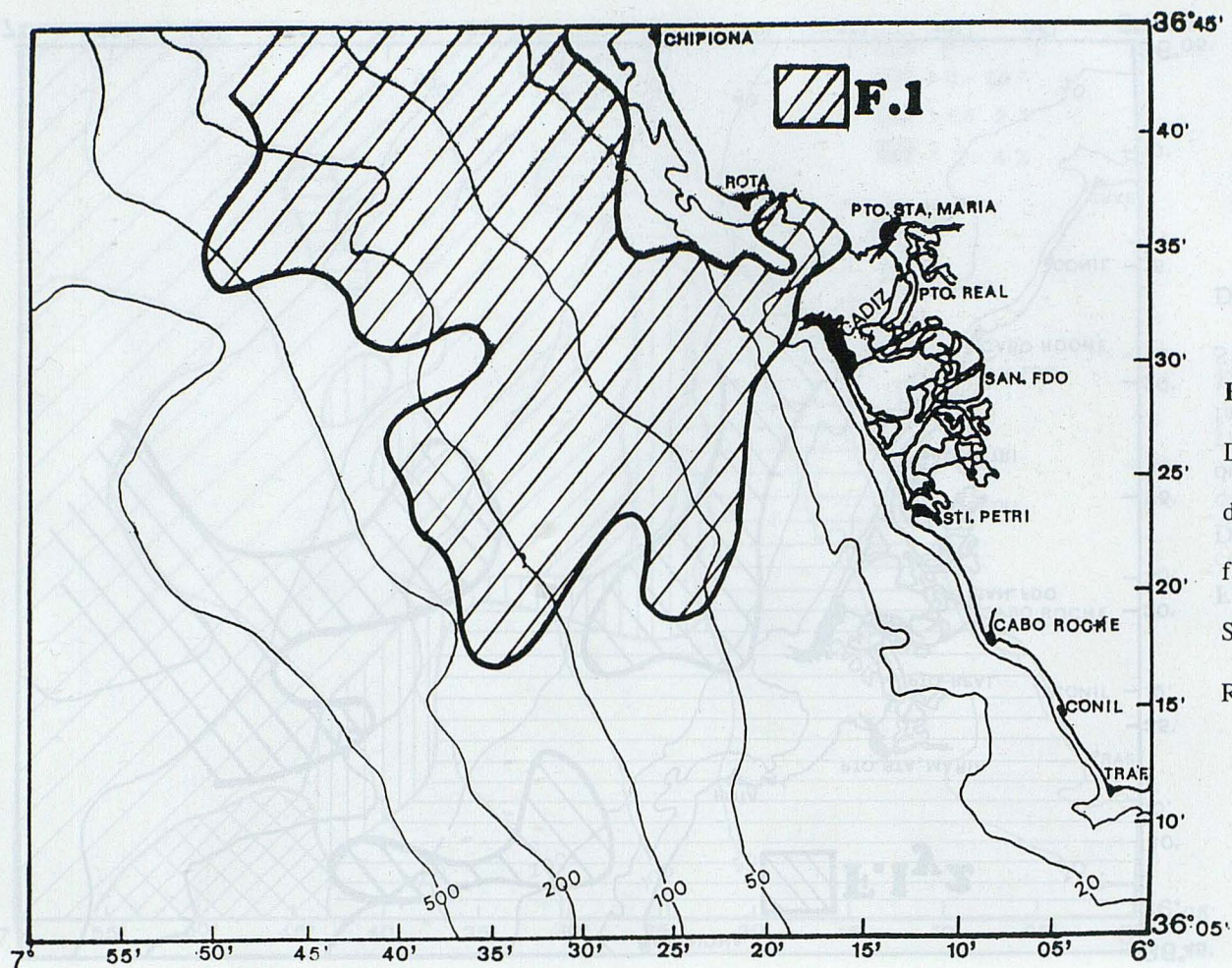
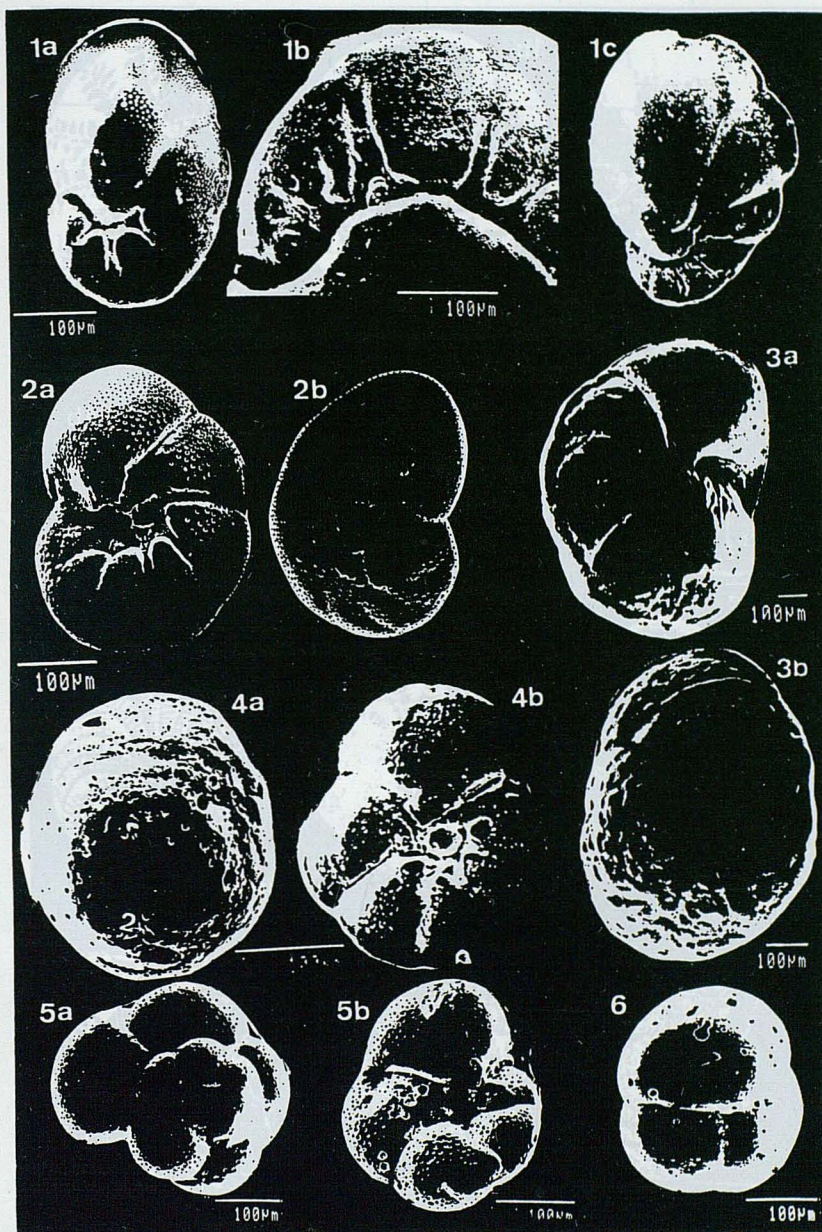
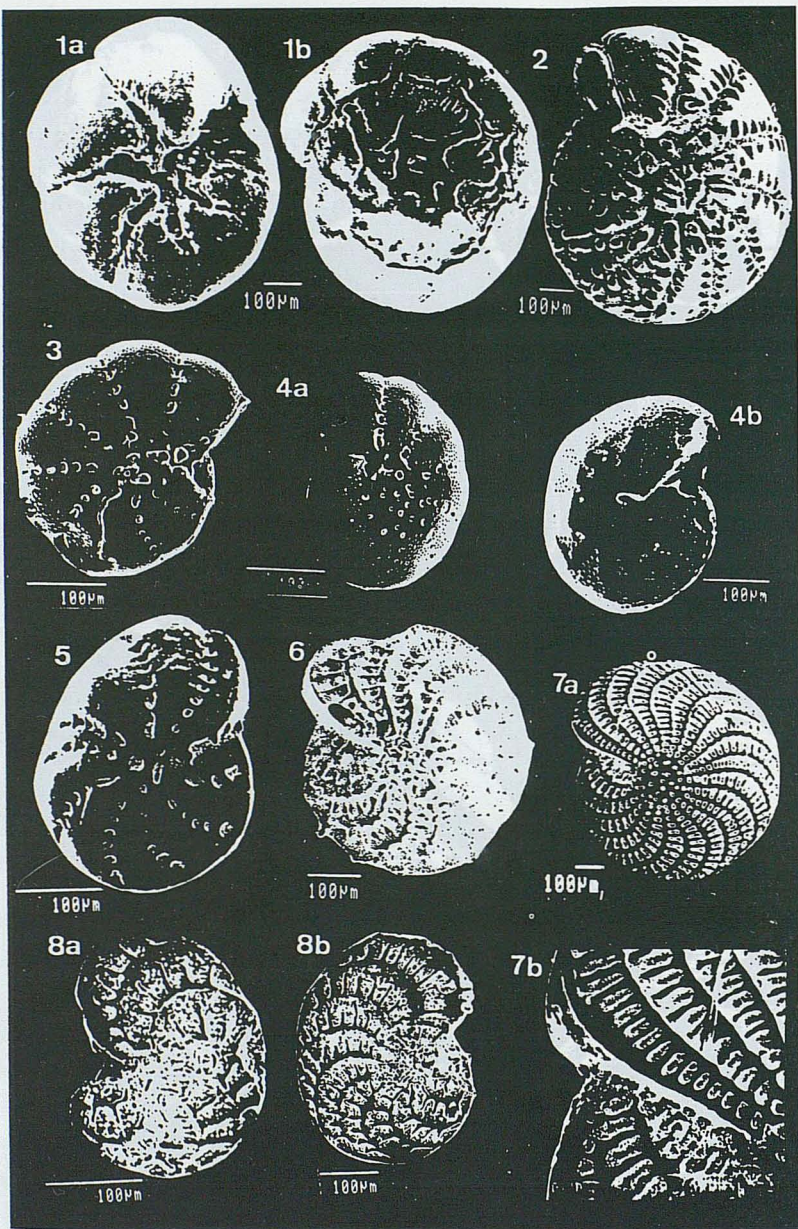


Figura 17.-
Distribución
de la tanato-
facies de la
Superfamilia
Rotaliacea.



LAMINA I: Fig. 1a-b-c. *Cancris auriculus* (Fichtel y Moll) 2 ejemplares y abertura. Fig. 2a-b. *Valvulineria bradyana* (Fornasini) cara umbilical y dorsal. Fig. 3a-b. *Eponides concameratus* (Williamson), cara umbilical y dorsal. Fig. 4 a-b. *Gavelinopsis praegeri* (Heron-Allen y Earland) cara dorsal y umbilical. Fig. 5a-b. *Rosalina globularis* (d'Orbigny) cara dorsal y umbilical. Fig. 6. *Sphaeroidina bulloides* d'Orbigny.



LAMINA II: Fig. 1a-b. *Ammonia beccarii* Linneo, cara umbilical y dorsal. Fig. 2. *Ammonia beccarii inflata* (Seguenza). Fig. 3. *Criboelphidium vadesnes* (Cushman y Brönnimann). Fig. 4a-b. *Criboelphidium cuvillieri* (Lévy) 2 ejemplares. Fig. 5. *Elphidium advenum* (Cushman). Fig. 6. *Elphidium macellum* (Fitchel y Moll). Fig. 7a-b. *Elphidium crispum* (Linneo) ejemplar y abertura. Fig. 8a-b. *Elphidium coplanatum* (d'Orbigny), 2 ejemplares.

EST.	F1	F2	EST.	F1	F2
2	0,949	-0,092	30	0,543	0,821
4	0,965	-0,082	31	0,961	0,238
7	0,978	0,057	33	-0,098	0,763
15	0,977	0,015	34	0,919	0,156
16	0,910	0,220	19	0,969	-0,069
24	0,969	-0,078	38	0,309	0,866
28	-0,053	0,943	44	-0,197	0,837

Tabla 1A. Matriz Varimax de los Factor Loadings (F1y F2) obtenida en la Superfamilia Discorbacea con valores superiores a 0,75 en las distintas estaciones (EST.).

ESPECIE	%	F1	F2
<i>Cancris auriculus</i>	3,5	-0,831	-0,037
<i>Valvulineria bradyana</i>	69,0	1,975	-0,161
<i>Eponides concameratus</i>	4,6	-0,316	-0,737
<i>Gavelinopsis praegeri</i>	13,7	-0,107	1,925
<i>Rosalina globularis</i>	5,1	-0,220	-0,836
<i>Sphaeroidina bulloides</i>	4,2	-0,500	-0,155

Tabla 1B. Valores de los Factor Scores en cada Factor Loading (F1 y F2) de las distintas especies (ESP) y la frecuencia relativa de cada una (%) en su grupo.

EST.	F.1	F.2	EST.	F.1	F.2
1	0,934	0,308	19	0,925	-0,012
2	0,946	0,264	20	0,878	0,418
3	0,965	0,199	21	0,895	0,255
4	0,968	0,172	23	0,435	0,871
6	0,939	0,232	24	0,896	0,340
7	0,971	0,150	25	0,956	0,226
8	0,919	0,192	31	0,934	0,258
9	0,893	0,226	32	0,944	0,037
10	0,592	0,784	33	0,841	0,439
11	0,534	0,834	34	0,892	0,426
12	0,905	0,021	35	0,872	0,236
13	0,995	0,015	36	0,957	0,179
14	0,955	0,186	37	0,919	0,377
15	0,904	0,064	38	0,929	0,177
16	0,957	0,217	41	0,799	0,212
17	0,961	0,217	43	0,820	0,153
18	0,971	0,099			

Tabla 2A. Matriz Varimax de los Factor Loadings (F.1 y F.2) obtenida en la Superfamilia Rotaliacea con valores superiores a 0,75 en las distintas estaciones (EST.).

ESPECIE	%	F1	F2
Ammonia beccarii	5,6	2,91	0,673
Ammonia beccarii inflata	9,4	-0,796	2,058
Criboelphidium vadesens	13,1	-0,068	-0,005
Criboelphidium cuvillieri	3,1	-0,422	-0,060
Elphidium advenum	7,3	0,340	-1,173
Elphidium macellum	4,4	-0,070	-0,854
Elphidium crispum	4,0	-0,624	-0,308
Elphidium coplanatum	2,1	-0,651	-0,332

Tabla 2B. Valores de los Factor Scores en cada Factor Loading (F1 y F2) de las distintas especies (ESP.) y la frecuencia relativa de cada una (%) en su grupo.

ANOMALÍAS GEOQUÍMICAS DE Pb Y Cu EN LA CABECERA DEL RÍO HUERVA: IMPLICACIONES MEDIOAMBIENTALES

P. Acero Salazar, J. Mandado Collado, F. J. Sanz Morales y F. J. Torrijo Echarri.*

* Área de Petrología y Geoquímica. Departamento de Geología. Universidad de Zaragoza.
C/ Pedro Cerbuna 12, 50009 ZARAGOZA.

Abstract

Basic concepts and methodology of geochemical prospecting were applied to the study of the degradation of Huerva river (Iberian Range, Zaragoza, Spain).

In this work, 77 samples of fine river sediments were collected along the river and its tributaire channels, and its contents in Lead and Copper were analyzed and statistically interpreted to select the "probably anomalous samples" and to provide basic information about the impact of these heavy metals on the environment.

1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años, el interés por la problemática medioambiental ha experimentado un extraordinario auge y, con ello, todas las ramas científicas han ampliado sus aplicaciones al estudio, caracterización y gestión del patrimonio natural.

La prospección geoquímica no es ajena a este crecimiento; aunque tradicionalmente su uso se ha reducido a la localización de acumulaciones metálicas y de hidrocarburos de interés económico, sus principios generales constituyen una poderosísima herramienta para los

estudios de tipo medioambiental. Este estudio pretende aplicar estos principios generales al estudio del nivel de degradación de un curso fluvial, caracterizando la extensión y causas de esta degradación.

2. CARACTERÍSTICAS GEOLÓGICO-GEOGRÁFICAS DE LA ZONA DE ESTUDIO

Este trabajo se ha realizado en la cuenca del río Huerva (Zaragoza, España). El río Huerva constituye una fuente hidrológica de primer orden en Aragón, ya que abastece directa o indirectamente a un gran número de poblaciones para su consumo y regadío. La cuenca ha sido escasamente estudiada desde el punto de vista hidrológico y geoquímico. Tan solo cabe reseñar los trabajos de Sánchez-Navarro (1985), que realiza una aproximación hidroeconómica a la zona de estudio, García (1986) y los trabajos del I.T.G.E., tanto en informes propios como en la Memoria del Mapa Hidrológico nº 40 "Daroca" a escala 1:200.000.

El río Huerva en la zona de estudio presenta una longitud total de unos 40 Km y, junto con su red de tributarios, drena una superficie total de casi 500 Km². Atraviesa las poblaciones de Fonfría, Bea, Lagueruela, Ferrerueta de Huerva, Badules, Villadoz, Villahermosa del Campo, Mainar, Villarreal de Huerva, Cerveruela y Vistabella. Se trata de poblaciones de pequeño tamaño (menos de 200 habitantes) cuyas actividades fundamentales son la agricultura y la ganadería, sin que apenas exista desarrollo industrial.

El clima de la zona es de tipo montañoso interior de carácter mediterráneo. Los veranos son cortos y frescos, y los inviernos largos y fríos, con frecuentes heladas. La temperatura media no sobrepasa los 12°C. Las precipitaciones varían entre 20-30 mm en Julio y Agosto y 480-550 mm en primavera, aunque siempre con importantes variaciones interanuales, lo que provoca una elevada variabilidad en la escorrentía eficaz, que ronda los 100-125 mm/año (Ascaso y Cuadrat, 1981).

La vía de acceso más sencilla es por la N-330 hasta Mainar, núcleo de comunicaciones a partir del cual se accede a la red de carreteras locales y comarcales, así como a caminos vecinales, en general bien conservados, que permiten un buen acceso al cauce en todo el tramo estudiado.

La zona se integra parcialmente dentro de la Rama Aragonesa o Externa de la Cordillera Ibérica, que forma una alineación montañosa en dirección NO-SE (Ibérica). Esta unidad estructural presenta un núcleo de materiales paleozoicos rodeados de materiales mesozoicos y cenozoicos. Está constituida en el área de estudio por las sierras de Oriche, Cucalón, del Peco, de Herrera, de Vicort y de Algairén, que delimitan la cuenca del Huerva, y a las que pertenecen la mayor parte de los materiales drenados por el río y su red de canales tributarios. En los afloramientos paleozoicos de la zona existe un gran número de mineralizaciones de carácter disperso y escasa entidad. En su mayoría se trata de sulfuros de Cu, Fe, Pb, Zn y Ba, dispuestos en filones de carácter masivo o diseminado.

La serie estratigráfica aflorante abarca desde el Cámbrico hasta el Cuaternario. En la zona concurren dos unidades estructurales paleozoicas separadas, según Carls (1983), por la falla de Datos; se trata de las unidades de Badules y de Herrera. Sobre este basamento hercínico aparece un tegumento del Buntsandstein, al que puede asociarse localmente el nivel inferior del Muschelkalk, dotado generalmente de una tectónica de revestimiento.

En cuanto a los caracteres hidrológicos de la cuenca, se pueden distinguir dos familias de afluentes:

- Afluentes circulantes por materiales paleozoicos, cuyo caudal es muy irregular, de forma que su actividad es casi exclusivamente primaveral.
- Afluentes circulantes por los materiales mesozoicos y cenozoicos de la cuenca de Calatayud-Montalbán, cuyo caudal es bastante constante, y que constituyen los aportes fundamentales en los meses estivales.

3. METODOLOGÍA

La campaña de campo se llevó a cabo entre los meses de Octubre de 1998 y Febrero de 1999. Durante la misma se tomaron 77 muestras de sedimentos finos en el lecho del cauce principal y sus tributarios, manteniendo un espaciado entre muestras en torno a 1 Km, como muestra la figura 1. Estos materiales son ampliamente utilizados en estudios geoquímicos, y su empleo ha resultado ser especialmente eficaz en el estudio de la dispersión de elementos

inmóviles y semimóviles (Rose *et al.*, 1979), aunque se ha utilizado también para el estudio de algunos elementos móviles (por ejemplo, el Mo).

Para este estudio se optó por realizar análisis de la fracción fina separada por tamizado. El empleo de esta fracción para campañas geoquímicas es un procedimiento muy contrastado y avalado por numerosos casos bibliográficos. Los estudios realizados por Gibbs (1977) sobre diferentes fracciones de sedimentos aluviales señalan un aumento considerable en la proporción de iones metálicos en aquellas de granulometría más fina. Beeson (1984) señala la enorme utilidad de los materiales finos para realzar las anomalías en la concentración de elementos metálicos y disminuir los límites de detección efectivos. Según este autor, este hecho debe fundamentalmente a la mayor presencia en esta fracción de partículas arcillosas capaces de adsorber gran número de iones. Por otra parte, el menor tamaño de grano proporciona muestras más representativas y una mayor homogeneidad en la distribución de valores. Los estudios realizados por Withney (1975) sobre diferentes fracciones granulométricas arrojan resultados similares.

Para el caso que nos ocupa, las determinaciones analíticas se han realizado sobre la fracción inferior a 0.16 mm, separada por tamizado.

La recogida de las muestras se realizó con la ayuda de palas de acero inoxidable. En cada estación de muestreo se tomaron aproximadamente 2 Kg de sedimento húmedo, aunque este peso varió en función del grado de humedad y tamaño de grano estimado.

4. TRATAMIENTO DE LAS MUESTRAS

En primer lugar se procedió al secado a 50°C de las muestras de campo en estufa. Posteriormente se realizó un tamizado para obtener la fracción inferior a 1mm, desechándose el resto. Seguidamente, se realizó un nuevo secado en estufa a 100° C durante 24 horas de la fracción seleccionada, y se aplicó a las muestras un tamizado posterior para obtener la fracción inferior a 0.16 mm, a la que se realizaron los análisis.

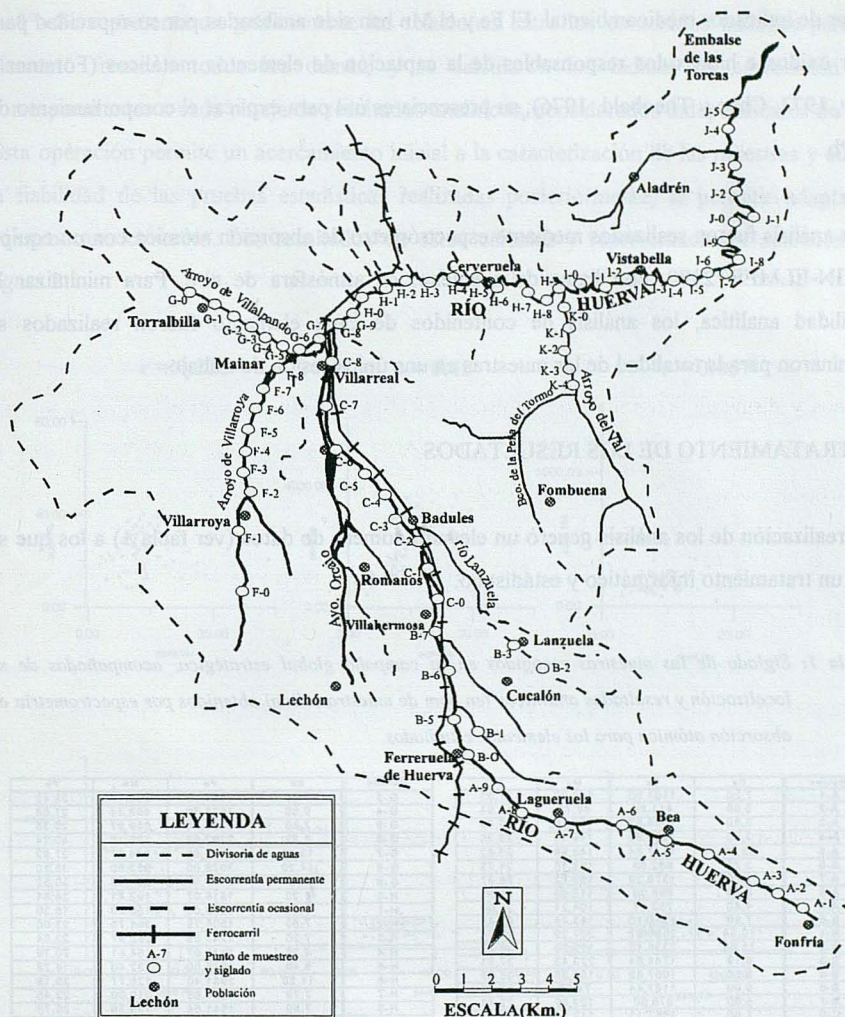


Figura 1: Esquema hidrológico de la cuenca y situación de las muestras.

Las muestras fueron sometidas a una extracción total con HNO_3 1N, a 50°C , durante 1 hora. La disolución resultante fué posteriormente filtrada, retirando el residuo sólido. Sobre el extracto ácido se realizaron determinaciones analíticas de los contenidos en Fe, Mn Cu y Pb. La elección del Cu se justifica por ser el más móvil de los metales existentes en las mineralizaciones del área, y el que más probabilidades tiene de hallarse en elevada concentración en los sedimentos fluviales. El Pb se ha escogido por su elevada toxicidad y su

carácter de indicador medioambiental. El Fe y el Mn han sido analizados por su capacidad para formar óxidos e hidróxidos responsables de la captación de elementos metálicos (Förstner y Müller, 1973; Chao y Theobald, 1976); su presencia es útil para explicar el comportamiento de Cu y Pb.

Los análisis fueron realizados mediante espectrómetro de absorción atómica con un equipo PERKIN-ELMER 2380, con llama de acetileno, en atmósfera de aire. Para minimizar la variabilidad analítica, los análisis de contenidos de cada elemento fueron realizados se determinaron para la totalidad de las muestras en una única sesión de trabajo.

5. TRATAMIENTO DE LOS RESULTADOS

La realización de los análisis generó un elevado número de datos (ver tabla 1) a los que se aplicó un tratamiento informático y estadístico.

Tabla 1: Siglado de las muestras recogidas en la campaña global estratégica, acompañadas de su localización y resultados analíticos (en ppm de muestra sólida) obtenidos por espectrometría de absorción atómica para los elementos estudiados.

Muestra	Cu	Fe	Mn	Pb
A-1	7,20	1104,00	140,80	27,92
A-2	3,00	411,89	86,78	11,94
A-3	3,60	1069,87	174,78	20,80
A-4	3,40	1201,93	146,59	23,36
A-5	28,80	1147,84	148,98	20,82
A-6	3,79	682,93	153,16	21,73
A-7	7,20	1379,28	153,72	26,37
A-8	6,40	996,00	117,00	36,90
A-9	4,40	752,11	104,21	26,00
B-0	7,90	1215,10	143,44	31,43
B-1	10,58	2520,27	207,29	27,16
B-2	11,00	3336,13	119,20	38,82
B-3	8,19	1744,64	223,43	37,71
B-5	9,80	1057,62	150,35	35,99
B-6	9,00	1167,44	74,56	30,79
B-7	5,60	975,90	123,59	22,14
C-0	7,60	1667,13	112,74	29,92
C-1	5,80	1006,08	139,61	29,80
C-2	7,60	1053,58	210,92	30,85
C-3	11,40	1920,08	102,00	41,04
C-4	19,58	3237,02	140,07	47,86
C-5	8,59	1218,17	207,09	32,85
C-6	6,79	1153,01	132,09	29,89
C-7	7,00	1575,84	147,59	31,30
C-8	6,19	1194,42	160,79	30,72
D-0	8,99	5012,19	163,08	11,99
D-1	9,40	3065,45	184,37	14,40
F-0	9,99	5422,79	1180,87	36,01
F-1	7,20	2925,88	238,19	25,98
F-2	7,39	1370,52	213,17	34,12
F-3	12,75	2078,43	246,50	34,55
F-4	8,82	1688,40	138,64	34,30
F-5	11,40	2410,48	260,25	32,31
F-6	7,60	1728,52	170,35	20,97
F-7	7,80	2234,75	225,27	35,14
F-8	13,35	3864,63	280,43	77,27
G-0	7,84	2588,57	401,71	15,11
G-1	9,20	1720,55	253,88	31,21
G-2	9,20	3615,93	181,40	25,16
SENSIBILIDAD	1,54	16,22*	1,34	3,8

Muestra	Cu	Fe	Mn	Pb
G-3	7,60	1851,78	233,17	35,42
G-4	9,80	3627,56	458,34	27,68
G-5	7,80	2399,76	259,97	25,38
G-6	8,82	2292,59	188,18	40,24
G-7	13,40	2683,68	244,57	37,92
G-8	14,20	3026,00	353,60	38,10
G-9	10,21	2147,07	261,53	30,52
H-0	8,20	1816,07	192,41	24,64
H-1	5,80	1206,00	138,00	15,30
H-2	7,80	1505,79	344,75	23,06
H-3	7,20	1243,88	262,97	22,54
H-4	4,20	1138,07	164,61	20,16
H-5	6,40	1676,00	132,40	15,28
H-6	11,20	2981,40	126,77	35,19
H-7	7,79	1525,83	219,09	23,45
H-8	7,60	1541,54	134,36	26,75
H-9	5,60	1257,72	230,35	27,19
I-0	11,20	3428,00	135,40	21,64
I-1	9,00	2684,82	159,13	16,33
I-2	11,80	2473,46	116,77	27,99
I-3	12,40	2492,00	225,20	17,96
I-4	11,57	2978,14	157,58	21,76
I-5	12,60	2484,00	215,80	24,60
I-6	17,39	3722,73	53,58	19,37
I-7	14,60	3024,60	130,03	32,81
I-8	4,99	1654,05	163,61	13,38
I-9	10,40	2342,14	166,81	26,00
J-0	9,59	2977,97	129,91	29,58
J-1	8,79	1344,31	149,41	34,76
J-2	9,40	2135,79	205,38	23,60
J-3	9,00	1938,00	163,80	18,84
J-4	9,39	1912,36	195,03	12,43
J-5	6,20	1423,72	242,15	8,52
K-0	15,99	2912,83	297,08	24,19
K-1	14,98	2379,38	242,53	12,39
K-2	13,59	3448,48	138,06	19,40
K-3	8,00	3025,70	96,39	9,40
K-4	7,00	3062,00	99,80	8,40
SENSIBILIDAD	1,54	16,22*	1,34	3,8

1º- Se representaron gráficamente las relaciones entre los contenidos hallados para cada elemento frente a todos los demás, y se calcularon los índices de correlación lineal correspondientes a cada pareja de resultados analíticos, considerados independientes del resto. Esta operación permite un acercamiento inicial a la caracterización de las muestras y aumenta la fiabilidad de las pruebas estadísticas realizadas posteriormente, al permitir adaptarlas a nuestro caso concreto. Los resultados de estos cálculos y representaciones aparecen en la figura 2

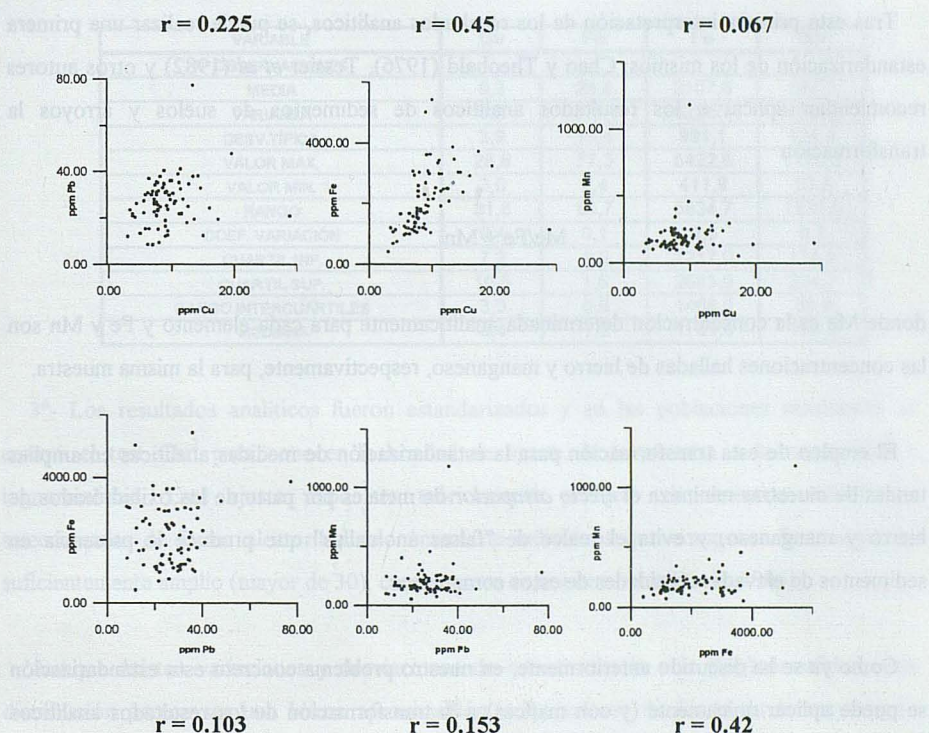


Figura 2: Índices de correlación entre parejas de resultados analíticos, y gráficos de dispersión correspondientes.

El análisis de estos cálculos y representaciones permite extraer dos conclusiones fundamentales:

- Los contenidos hallados para Cu presentan una notable correlación positiva con los contenidos de Fe, lo que puede estar relacionado, al menos en parte, con la presencia de oxihidróxidos de hierro, con elevada capacidad de adsorción de este elemento.

- Los contenidos en Pb no presentan correlación lineal con los datos analíticos de hierro y manganeso. No es descabellado suponer que la presencia de Pb en las muestras está más relacionada con la adsorción a minerales arcillosos y a la materia orgánica.

Tras esta primera interpretación de los resultados analíticos, se puede realizar una primera estandarización de los mismos. Chao y Theobald (1976), Tessier *et al* (1982) y otros autores recomiendan aplicar a los resultados analíticos de sedimentos de suelos y arroyos la transformación

$$Me/Fe + Mn$$

donde Me es la concentración determinada analíticamente para cada elemento y Fe y Mn son las concentraciones halladas de hierro y manganeso, respectivamente, para la misma muestra.

El empleo de esta transformación para la estandarización de medidas analíticas en amplias tandas de muestras minimiza el *efecto atrapador* de metales por parte de los oxihidróxidos de hierro y manganeso, y evita el realce de "falsas anomalías" que produce la presencia en sedimentos de elevadas cantidades de estos compuestos.

Como ya se ha discutido anteriormente, en nuestro problema concreto esta estandarización se puede aplicar únicamente (y con matices) a la transformación de los resultados analíticos obtenidos para el Cu. La transformación más efectiva a aplicar debe ser

$$Me/Fe$$

ya que los contenidos en Mn no presentan correlación lineal con los resultados analíticos de Cu.

Para el caso del Pb, no es conveniente aplicar ninguna correlación que implique a hierro y manganeso, por lo que, en lo sucesivo y a efectos estadísticos, se considerarán únicamente sus resultados analíticos directos.

2°- Se calcularon los parámetros estadísticos básicos para cada elemento (tabla 2), con el fin de realizar una aproximación general a la caracterización de las poblaciones tratadas.

Tabla 2: Parámetros estadísticos considerados en la interpretación de los datos.

VARIABLE	Cu	Pb	Fe	Mn
Nº OBSERVACIONES	77			
MEDIA	9,3	26,8	2107,6	197,1
VARIANZA	5,3	107,1	982265,8	18066,6
DESV.TÍPICA	3,9	10,4	991,1	134,4
VALOR MAX.	28,8	77,3	5422,8	1180,9
VALOR MIN.	3,0	8,4	411,9	53,6
RANGO	31,8	85,7	5834,7	1234,5
COEF. VARIACIÓN	0,4	0,1	0,5	0,7
CUARTIL INF.	7,2	1,2	1217,0	134,9
CUARTIL SUP.	10,5	1,6	2685,0	224,7
RANGO INTERCUARTILES	3,3	0,6	1468,0	89,8
MEDIANA	8,4	1,3	1781,0	159,9

3°- Los resultados analíticos fueron estandarizados y en las poblaciones resultantes se ensayó el test χ^2 para conocer la bondad de ajuste de la muestra a la normalidad y lognormalidad. Este ajuste debe ser teóricamente perfecto en muestras estadísticas seleccionadas de forma aleatoria si el número de individuos que componen la muestra es suficientemente amplio (mayor de 30), como ocurre en nuestro caso (Davis, 1986).

Aunque existen variaciones y desviaciones de esta tendencia a la (log)normalidad, esta distribución parece ser una buena aproximación a los valores de fondo en la mayoría de estudios geoquímicos (Rose, 1972). Cuando dicho ajuste se produce, es usual en este tipo de estudios establecer un umbral de anomalías a 2 desviaciones típicas de la media. (Hawkes y Webb, 1962; Lepeltier, 1969). En este estudio se ha optado por considerar posiblemente anómalas las muestras cuyos contenidos en Cu o Pb superen el valor de la media poblacional más 1.5 desviaciones típicas. Este umbral, menos restrictivo, es también más adecuado para campañas de aproximación, en las que se desconoce el sistema a estudiar y garantiza la detección de todas las anomalías presentes en el área de estudio.

6. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

Los resultados obtenidos aparecen detallados a continuación. Las curvas estandarizadas corresponden a las distribuciones de datos con mejores valores de ajuste.

- **Cu:** Se han obtenido buenos resultados para la distribución lognormal de los datos Cu/Fe (ver tabla 3). La curva estandarizada para estos datos (figura 3) presenta sesgo negativo. Para el resto de las distribuciones, los valores de ajuste a la (log)normalidad son excesivamente altos, y no deben ser considerados en la interpretación.

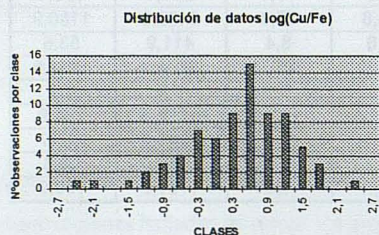


Tabla 3: Resultados del test χ^2 . En **negrita** se muestra el mejor ajuste obtenido.

Resultados del test CHI-2			
Cu	Log(Cu)	Cu/Fe	Log(Cu/Fe)
21,31	14,56	38,71	9,88

Figura 3: Distribución de frecuencias log(Cu/Fe).

- **Pb:** El mejor ajuste corresponde a los resultados analíticos directos, sin transformaciones (tabla 4). La curva estandarizada correspondiente, aunque presenta sesgo negativo (figura 4), presenta una gradación bastante continua entre los valores superiores a la media (a los que corresponde una forma normal estándar de signo positivo), que es en los que se centra este estudio de anomalías.

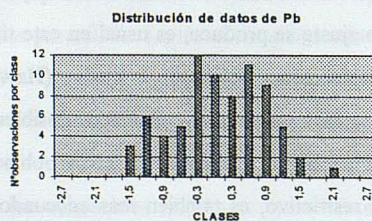


Tabla 4: Resultados del test χ^2 . En **negrita** se muestra el mejor ajuste obtenido

Resultados del test CHI-2	
Pb	Log(Pb)
6,25	12,74

Figura 4: Distribución de frecuencias de Pb.

Tabla 5: Resultados analíticos obtenidos para Cu y Pb y los correspondientes valores estandarizados (F.N.STD) para la distribución de resultados analíticos de Pb y para la transformación $\log(\text{Cu}/\text{Fe})$. Las muestras "posiblemente anómalas" deducidas por la aplicación de umbral 1.5 desviaciones típicas a partir de la media aparecen marcadas en negrita.

MUESTRA	ppm Cu	ppm Pb	FNSTD Cu	FNSTD Pb	MUESTRA	ppm Cu	ppm Pb	FNSTD Cu	FNSTD Pb
A-1	7,20	27,92	0,95	0,11	G-3	7,60	35,42	-0,27	0,83
A-2	3,00	11,94	1,24	-1,44	G-4	9,80	27,68	-1,38	0,08
A-3	3,80	20,80	-0,66	-0,58	G-5	7,80	25,38	-0,88	-0,14
A-4	3,40	23,36	-1,26	-0,33	G-6	8,82	40,24	-0,44	1,30
A-5	28,80	20,82	4,52	-0,58	G-7	13,40	37,92	0,25	1,07
A-6	3,79	21,73	0,53	-0,49	G-8	14,20	38,10	0,08	1,09
A-7	7,20	26,37	0,36	-0,04	G-9	10,21	30,52	0,12	0,36
A-8	6,40	36,90	0,91	0,97	H-0	8,20	24,64	-0,02	-0,21
A-9	4,40	26,00	0,67	-0,08	H-1	5,80	15,30	0,15	-1,11
B-0	7,90	31,43	0,95	0,45	H-2	7,80	23,06	0,34	-0,36
B-1	10,58	27,16	-0,21	0,03	H-3	7,20	22,54	0,64	-0,41
B-2	11,00	38,82	-0,85	1,16	H-4	4,20	20,16	-0,55	-0,64
B-3	8,19	37,71	0,08	1,05	H-5	6,40	15,28	-0,46	-1,12
B-5	9,80	35,99	1,88	0,89	H-6	11,20	35,19	-0,51	0,81
B-6	9,00	30,79	1,39	0,38	H-7	7,79	23,45	0,30	-0,33
B-7	5,60	22,14	0,61	-0,45	H-8	7,60	26,75	0,21	-0,01
C-0	7,60	29,92	0,00	0,30	H-9	5,60	27,19	-0,06	0,04
C-1	5,80	29,80	0,63	0,29	I-0	11,20	21,64	-0,88	-0,50
C-2	7,60	30,85	1,22	0,39	I-1	9,00	16,33	-0,81	-1,01
C-3	11,40	41,04	0,70	1,37	I-2	11,80	27,99	0,13	0,11
C-4	19,58	47,86	0,75	2,03	I-3	12,40	17,96	0,24	-0,86
C-5	8,59	32,85	1,16	0,58	I-4	11,57	21,76	-0,42	-0,49
C-6	6,79	29,89	0,68	0,30	I-5	12,60	24,80	0,29	-0,19
C-7	7,00	31,30	-0,06	0,43	I-6	17,39	19,37	0,07	-0,72
C-8	6,19	30,72	0,35	0,38	I-7	14,60	32,81	0,16	0,58
D-0	8,99	11,99	-2,46	-1,43	I-8	4,99	13,38	-1,08	-1,30
D-1	9,40	14,40	-1,04	-1,20	I-9	10,40	26,00	-0,06	-0,08
F-0	9,99	36,01	-2,39	0,89	J-0	9,59	29,58	-0,91	0,27
F-1	7,20	25,98	-1,63	-0,08	J-1	8,79	34,76	0,96	0,77
F-2	7,39	34,12	0,45	0,71	J-2	9,40	23,60	-0,09	-0,31
F-3	12,75	34,55	0,79	0,75	J-3	9,00	18,84	0,05	-0,77
F-4	8,82	34,30	0,37	0,72	J-4	9,39	12,43	0,20	-1,39
F-5	11,40	32,31	0,10	0,53	J-5	6,20	8,52	-0,12	-1,77
F-6	7,60	20,97	-0,09	-0,56	K-0	15,99	24,19	0,50	-0,25
F-7	7,80	35,14	-0,70	0,80	K-1	14,98	12,39	0,86	-1,39
F-8	13,35	77,27	-0,73	4,88	K-2	13,59	19,38	-0,38	-0,72
G-0	7,84	15,11	-1,08	-1,13	K-3	8,00	9,40	-1,44	-1,68
G-1	9,20	31,21	0,43	0,42	K-4	7,00	8,40	-1,82	-1,78
G-2	9,20	25,16	-1,54	-0,16					

7. CONCLUSIONES

1 - En los sedimentos estudiados parece existir un bajo grado de correlación entre los contenidos de Pb y la presencia de Fe y Mn, lo que sugiere que la acumulación del Pb en los materiales finos debe estar más relacionada con la adsorción a minerales arcillosos y con la presencia de materia orgánica. La elevada capacidad de ésta última para formar complejos de Pb es bien conocida, y señalada por muchos autores (Rose *et al.*, 1979).

Los contenidos hallados de Cu, por el contrario, pueden ser explicados, al menos en parte, por la adsorción a compuestos de hierro, principalmente óxidos y oxihidróxidos, pero no de

Mn, del que parecen ser estadísticamente independientes.

2 - Las poblaciones estandarizadas para ambos elementos presentan sesgo negativo, es decir, una desviación hacia los valores altos. Esta tendencia puede expresar la presencia dispersa en la zona de diversos focos contaminantes, ya que la gradación de clases es bastante continua, especialmente en el caso del Cu.

3 - En la población de contenidos de Pb, aunque sólo dos muestras superan el umbral de anomalía propuesto (1.5 desviaciones típicas a partir de la media) el contenido medio en Pb hallado para los sedimentos del río Huerva supera ampliamente el contenido medio estimado para sedimentos fluviales (17 ppm, según Rose *et al.*, 1979) y se aproxima al contenido medio estimado para cenizas de plantas (30 ppm), lo que da una idea del notable nivel de degradación existente en el cauce.

4 - En el caso del Cu únicamente 2 muestras superan el umbral propuesto de anomalía. Los contenidos analizados para este metal se encuentran en rangos normales estimados para sedimentos fluviales, que se sitúan en 15 ppm de Cu en promedio, según Rose *et al.* (1979).

BIBLIOGRAFÍA

- ASCASO, A. y CUADRAT, J.M. (1981): El Clima. In: *Geografía de Aragón, I*. Ed. Guara, Zaragoza; 93-140.
- BEESEON, R. (1984): The use of the fine fractions of stream sediments in geochemical exploration in arid and semiarid terrains. *Jour. Geochem. Explor.*, 22; 119-132.
- CARLS, P. (1983): *La zona Asturoccidental-Leonesa en Aragón y el Macizo del Ebro como prolongación del Macizo Cantábrico*. Libro Jubilar J.M. Ríos, III. IGME; 11-32.
- CHAO, T.T. (1984): Use of partial dissolution techniques in geochemical exploration. *Jour. Geochem. Explor.*, 20; 101-135.
- CHAO, T.T. and THEOBALD, P.K. (1976): The significance of secondary iron and manganese oxides in geochemical exploration. *Econ. Geol.*, 71; 1560-1569.
- DAVIS, J.C. (1986): Statistics and data analysis in Geology. In: *Elementary Statistics*. Ed. Wiley-John and Sons. New York. 2nd ed.; 11- 105.

- FÖRSTNER, U. and MÜLLER, G. (1973): Heavy metals accumulation in river sediments: a response to environmental pollution. *Geoforum*, 14/73.
- GARCÍA, R. (1986): *Estudio hidrológico de los ríos Jalón, Huerva, Gállego y Ebro y evaluación del efecto contaminante de los vertidos residuales de la ciudad de Zaragoza*. Institución Fdo. El Católico, C.S.I.C., Zaragoza; 228 pp.
- GIBBS, R.M. (1977): Transport phases of transition metal in the Amazon and Yukon rivers. *Geol. Soc. Am. Bull* 88; 829-843.
- HAWKES, H.E. and WEBB, J.S. (1972): *Geochemistry in mineral exploration*. Harper and Row, New York; 415 pp.
- ITGE (1995): *Mapa hidrogeológico de España escala 1:200.000. Hoja nº 40 "Daroca" y Memoria anexa*. Dirección de Aguas Subterráneas y Geotecnia.; 72 pp.
- LEPELTIER, C. (1969): A simplified estatistical treatment of geochemical data by graphphical representation. *Econ. Geol.* 54; 1281-1290.
- ROSE, A.W. (1972): Statistical Interpretation Techniques in Geochemical Exploration. *Transactions*, 252; 233-252.
- ROSE, A.W.; HAWKES, H.E. and WEBB, J.S. (1979): *Geochemistry in mineral exploration*. Academic Press; 657 pp.
- SÁNCHEZ NAVARRO, J.A. (1985): *Estudio hidrogeológico e hidroeconómico de la cuenca del río Huerva aguas arriba del Embalse de Las Torcas*. (Provincias de Zaragoza y Teruel). Tesis Licenc. Univ. Zaragoza. Centro de Estudios Darocenses; 203 pp.
- TESSIER, A.; CAMPBELL, P.G.C. and BISSON, M. (1982): Secuential extraction procedure for the speciation of particulate trace metals. *Anal. Chem.*, 51; 844-851.
- WITHNEY, P.R. (1975): Relationship of manganese-iron oxides and associated heavy metals to grain size in stream sediments. *Jour. Geoch. Explor.*, 4; 251-263.

I. INTRODUCCIÓN

Son numerosos los autores que a lo largo de la historia han estudiado diferentes aspectos de los materiales torcenses del área comprendida entre las localidades de Riela y La Alfranca de Doda Codina, aunque es destacable que ninguno haga referencia a la existencia de nodulos carbonizados. Incluso Martínez (1986), que realiza un estudio muy detallado de los antracnoides en esta área, no indica su existencia.

GÉNESIS DE NÓDULOS CARBONATADOS EN LA FORMACIÓN TURMIEL, RICLA (ZARAGOZA)

F. J. Torrijo Echarri, J. Mandado Collado, F. J. Sanz Morales, P. Acero Salazar y
M. E. Bona Artazos *

*Área de Petrología y Geoquímica. Departamento de Geología. Universidad de Zaragoza. C/ Pedro Cerbuna 12, 50009 ZARAGOZA

Abstract

Carbonate nodules of the Turmiel Formation (Ricla-Zaragoza) were studied. The nodules are included in limestones and mudstones, and contain calcite, detrital particles of host, organic matter, and mould of fossils. The cement is microsparitic calcite.

Content in authigenic cement decreases outwards the nodules related to the ground waters and the organic matter decomposition for bacterian action. A sincompactacional model, and a displacive growth are proposed.

1. INTRODUCCIÓN

Son numerosos los autores que a lo largo de la historia han estudiado diferentes aspectos de los materiales toarcienses del área comprendida entre las localidades de Ricla y La Almunia de Doña Godina, aunque es destacable que ninguno haga referencia a la existencia de nódulos carbonatados. Incluso Martínez (1986), que realiza un estudio muy detallado de los ammonoideos en este área, no indica su existencia.

Este trabajo se centra en el estudio petrográfico, geoquímico y mineralógico de los mismos, que aportan datos que permiten discernir el origen de los nódulos, proporcionando un modelo genético para ellos, que se basa en el modelo de clasificación propuesta por Torrijo *et al.* (1997).

2. LOCALIZACIÓN GEOGRÁFICA Y MARCO GEOLÓGICO

2.1. Localización geográfica

La situación del punto de estudio se localiza al este de Zaragoza, en el extremo NO de la Rama Aragonesa de la Cordillera Ibérica. La Región se sitúa en la zona NO de la hoja de La Almunia de Doña Godina (410) del Mapa Topográfico Nacional a escala 1:50.000.

El perfil se sitúa en una trinchera, en el p.k. 266+500, del ferrocarril Madrid-Zaragoza, al oeste del río Jalón y al SO de Ricla. Este perfil fue publicado por Goy *et al.* (1988), aunque fue realizado anteriormente por Martínez (1986) en su Tesis de Licenciatura.

2.2. Marco Geológico

El punto de estudio está limitado por dos conjuntos claramente diferenciables; el primero (al NO, O y S) está compuesto por los materiales paleozoicos de la Sierra del Moncayo y sus prolongaciones de la Sierra de la Virgen y de Vicort; estos macizos están rodeados por materiales triásicos y jurásicos y algunos afloramientos puntuales cretácicos. En general los afloramientos mesozoicos tienen carácter discontinuo y están bastante tectonizados (figura 1).

El segundo conjunto (al N y E) corresponde a los materiales terciarios y cuaternarios de la Depresión del Ebro.

Los materiales en los que se ha centrado el estudio pertenecen al Jurásico inferior (Lías).

Los afloramientos jurásicos referentes a este sector de la Rama Aragonesa comprenden los alrededores de la Sierra del Tablado, Tabuenca, Morata, Herrera y Ricla.

Los materiales donde se ubican los nódulos pertenecen al Piso Toarciense, el cual está constituido por calizas y margas con un acusado carácter rítmico y se podrían incluir, más concretamente, en la Formación Alternancia de margas y calizas de Turmiel (Goy *et al.*, 1976).

Entre las calizas que constituyen los ritmos, dominan en general de forma muy neta los *calcimudstones* grumelares con muy escaso contenido en fragmentos de conchas; ocasionalmente, sobre todo en la parte inferior, se encuentran *wackestones* de bioclastos con lamelibranquios, gasterópodos, braquiópodos y foraminíferos fundamentalmente. De forma excepcional, se observan *packstones* en algunos niveles muy concretos, relacionados con pequeñas discontinuidades. Entre los macrofósiles dominan los ammonites y belemnites, siendo escasos, menos en las primeras capas, los organismos de vida bentónica como lamelibranquios, braquiópodos, equinodermos, briozoos, esponjas, corales, etc.

Estos materiales corresponden a una plataforma carbonatada externa, relativamente bien oxigenada durante parte del Toarciense inferior, lo que permite el desarrollo de fauna bentónica abundante y diversificada. Posteriormente, y casi durante todo el resto del Toarciense, se produce un empobrecimiento de la oxigenación del fondo, lo que dificulta el desarrollo de organismos bentónicos (Goy *et al.*, 1988).

Martínez (1986), basándose en faunas de ammonites, argumenta que, durante el Toarciense, este sector de la Cordillera Ibérica estaría situado dentro de un dominio subboreal, con algunos momentos de marcada influencia mediterránea dentro del dominio del Tethys.

3. METODOLOGÍA

Se muestrearon nueve nódulos separándolos de la roca encajante de manera manual y retirando posteriormente del mismo modo las superficies de alteración. A continuación se subseccionaron cada uno de los nódulos, seleccionando de cada subsección una muestra para su estudio en lámina delgada y otra para su trituration y posterior análisis químico, tal y como propone Raiswell (1971).

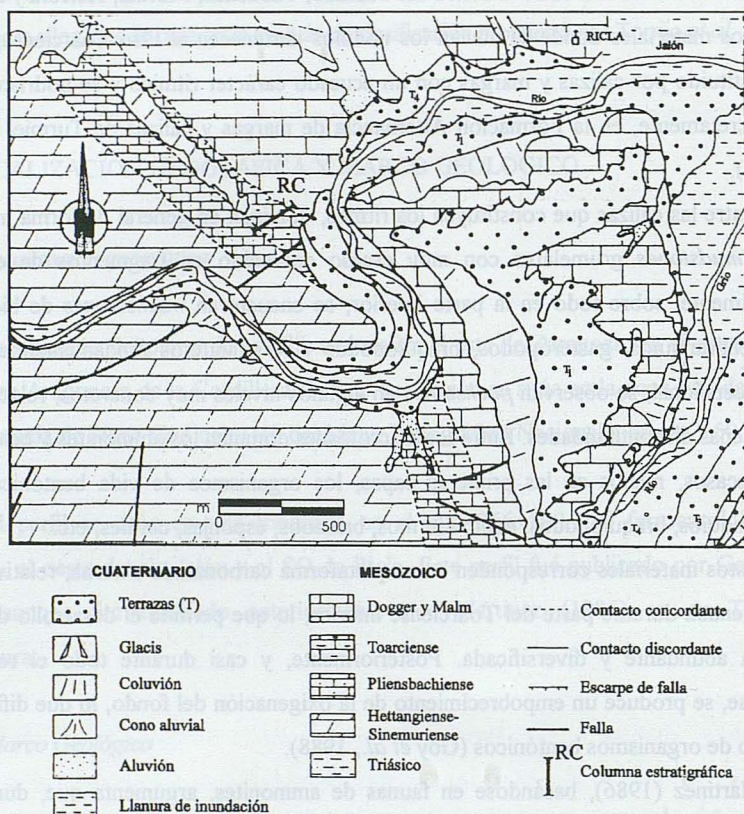


Figura 1. Situación geológica de la columna levantada en el Toarciense al SO de Ricla (Torrijo, 1999).

La trituración se realizó mediante trituradora de mandíbulas y molienda de la fracción extraída con molino de aros, hasta un tamaño de grano inferior a 60 μm . Para ello se usaron los equipos del Servicio de Preparación de Rocas y Materiales Duros de los Servicios de Apoyo a la Investigación de la Universidad de Zaragoza.

El análisis químico de las muestras se realizaron en el Laboratorio "Juan Tena" del Área de Petrología y Geoquímica del Departamento de Ciencias de la Tierra de la Universidad de Zaragoza, y en el Laboratorio de Análisis Químico de la empresa Laboratorios Proyex, S.A.

3.1. Disgregación de las muestras

La disgregación de las muestras carbonatadas es un problema analítico sencillo que requiere pocas modificaciones en función de las características de la misma. El principal problema radica en la presencia de fases no carbonatadas que puedan ser afectadas por el tratamiento químico y que, al liberar sus elementos a la solución, dificultarían el análisis geoquímico de los resultados. Por ello, se ha seleccionado una sistemática de extracción estándar, de acuerdo con la metodología de Brand y Veizer (1980), que consiste en realizar un ataque de 250 mg de muestra con HCl al 3% (aproximadamente 0.8N) durante dos horas, con agitación intermitente y calentamiento a unos 50°C. Mediante este tipo de extracción, se disuelven, además de los carbonatos, otros componentes tales como oxihidróxidos de hierro y manganeso, sulfuros ferrosos y otros minerales solubles que pudieran estar presentes en la muestra; pero no se destruye la red de los filosilicatos, aunque sí afecta a la capa de cambio de los mismos. Un tratamiento químico menos agresivo no llegaría a solubilizar totalmente a la dolomita que pudiera estar presente en la muestra.

3.2. Residuo insoluble

La valoración gravimétrica del residuo insoluble al ataque ácido, expresada en % respecto al peso inicial de muestra, se expresa como R.I.; que corresponde al contenido de la fracción de minerales arcillosos, cuarzo y otros silicatos detríticos de la roca, no disueltos durante el ataque.

3.3. Contenido en carbonato

La determinación del contenido en carbonato se ha realizado mediante el cálculo de la pérdida el peso por ignición (Dean, 1974). Se basa en la interpretación de que las pérdidas de peso tras calentamientos escalonados a 200, 500 y 900°C corresponden a los contenidos de agua, materia orgánica y CO₂ respectivamente.

3.4. Elementos mayores

El análisis de cationes, excepto el estroncio, se efectuó por espectrometría de absorción atómica, con un equipo PERKIN-ELMER 2380 con llama de acetileno en atmósfera de aire, en las siguientes condiciones:

- El Ca y el Mg por absorción y en presencia de 0.1% de La^{3+} . En base a las condiciones analíticas, proporción muestra-soluto en el analito y grados de dilución, los límites de detección en roca se establecen en 1000 ppm para el Ca y 20 ppm para el Mg.

- El Fe y Mn por medida directa de la absorción, con un límite de detección de 100 ppm para el Fe y de 6.5 ppm para el Mn.

- Na y K por emisión, el primero en presencia de 0.15% de KCl. El límite de detección es de 10 ppm para el sodio y 50 ppm para el potasio.

Tan sólo se realizaron diluciones al 10% para la determinación de Ca^{2+} y Mg^{2+} , ya que el resto de los cationes se presentan en baja concentración.

El estroncio se determinó también por espectrometría de absorción atómica, con un equipo PERKIN-ELMER 3030 con llama de óxido nitroso en atmósfera de aire. Los límites de detección se establecen en 5 ppm.

3.5. Mineralogía

A partir de las muestras se realizaron secciones pulidas y láminas delgadas en el Servicio de Preparación de Rocas y Materiales Duros de la Universidad de Zaragoza. Antes del recubrimiento de estas últimas, se hizo la observación de las propiedades luminiscentes de los cristales que componen las muestras carbonatadas. Mediante esta técnica se intentó identificar si la incorporación de elementos tales como Fe y Mn en la red del carbonato era o no significativa. Para ello se utilizó el equipo de catodoluminiscencia del Departamento de Geología, modelo 8200 MK II de TECHNOSYN. Los resultados de esta técnica

demonstraron el carácter no luminiscente de prácticamente la totalidad de las muestras analizadas.

El estudio petrográfico convencional permite identificar la distribución textural y estructural de los componentes, así como una semicuantificación de los mismos, facilitando la identificación de subestructuras y variaciones composicionales en el interior de los nódulos.

4. RESULTADOS

4.1. Distribución y geometría

Los nódulos se disponen paralelos a la estratificación existente en la roca encajante. Se ubican en niveles bien definidos, presentando una correlación a gran escala dentro del afloramiento.

La laminación alrededor de los nódulos está deformada y envolviendo a éstos; sin observarse láminas que los corten. Esto representa una clara evidencia de desplazamiento de la roca encajante durante el crecimiento del nódulo.

El límite entre éstos y la roca encajante es muy nítido, ya que los materiales encajantes presentan una laminación bastante marcada. Además presentan una fina coraza de naturaleza carbonatada enriquecida con respecto a la roca encajante, excepto en la muestra Rn-01, aunque empobrecida respecto a los nódulos.

En los nódulos se observan fracturas con continuidad dentro de la roca que los rodea. Estas fracturas se presentan perpendiculares a la estratificación y parecen estar asociadas a una etapa distensiva que afectó a estos materiales después de la finalización del crecimiento de los nódulos, ya que cortan por igual a éstos y a la roca encajante.

Por último, es importante destacar que no se observa ningún indicio de laminación dentro de los nódulos, lo que podría ser coherente con un desplazamiento del nódulo desplazando a la roca encajante.

Tanto en la roca encajante como en los nódulos se ha constatado la presencia de restos fósiles (ammonoideos, gasterópodos, crinoides,...).

In situ, los nódulos son de color gris oscuro, presentan una forma ovoide y se presentan paralelos al plano de estratificación. Sus diámetros mayores varían de 9,1 a 24,3 cm (tabla 1).

TABLA 1. Parámetros morfológicos y características de situación de los nódulos estudiados.

Muestra	Forma	Diámetro mayor*	Diámetro intermedio*	Diámetro menor*	Material encajante	Localización
Rn-01	Esferoide oblato-ovoide	24.3	19.7	4.5	Marga	Ricla (capa 253)
Rn-02	Esferoide oblato-ovoide	14.7	8.6	3.3	Marga	Ricla (capa 253)
Rn-03	Ovoide	9.1	7.8	3.2	Marga	Ricla (capa 253)
Rn-04	Ovoide-cacahuete	17	10	6.2	Marga	Ricla (capa 253)
Rn-05	Esferoide oblato-ovoide	16	9.7	5.5	Lutita margosa	Ricla (capa 255)
Rn-06	Ovoide	10.8	8.4	5.4	Lutita margosa	Ricla (capa 255)
Rn-07	Ovoide	15.7	15.4	5.6	Lutita margosa	Ricla (capa 255)
Rn-08	Ovoide	11.2	7.9	5.7	Marga	Ricla (capa 295)
Rn-09	Esferoide oblato-ovoide	12	3.7	9	Marga	Ricla (capa 295)

* Los diámetros están establecidos en cm.

Algunos nódulos presentan formas más esferoidales, lo que podría deberse a la coalescencia de dos o más nódulos carbonatados.

Su superficie viene caracterizada por la presencia de una fina coraza carbonatada que los separa de la roca encajante.

4.2. Características microscópicas

Los nódulos están constituidos por calcita microesparítica ($<25\text{ }\mu\text{m}$), con abundante contenido en materia orgánica, restos de la roca encajante, numerosos restos fósiles y pirita.

La roca encajante englobada se caracteriza por poseer un color marrón anaranjado, es de naturaleza margosa, y presenta berthierina, fragmentos de micas, cuarzos monocristalinos y abundantes óxidos de hierro. La mayor parte de estos restos de roca se sitúan en la parte exterior de los nódulos, aunque puntualmente se observan pequeños restos berthierinizados en el interior de algún nódulo.

El contenido fosilífero dentro de los nódulos es bastante inferior al encontrado en la roca encajante y se compone de numerosos moldes de moluscos (gasterópodos, bivalvos,...), braquiópodos, ammonoideos y restos de equinodermos. Los moldes están constituidos por un cemento de calcita esparítica, que puntualmente se encuentra reemplazado por pirita framboidal. Los restos de equinodermos son fundamentalmente placas de crinoide, compuestas de un monocristal de calcita con abundante contenido en óxidos de hierro, aunque también se encuentra algún fragmento de tallo.

La pirita se presenta como pequeños agregados subesféricos (pirita framboidal). En muchas ocasiones se presenta reemplazando a la calcita esparítica que constituye los moldes fósiles, llegando, en algunos casos, a reemplazarla por completo.

Presentan una red de fracturas perpendiculares a la dirección de estratificación de la roca encajante, rellenas de calcita esparítica en mosaico drúsico y, puntualmente, cemento ferruginoso. Estas fracturas son posteriores a la formación de los nódulos y están relacionadas con una etapa distensiva que actuó sobre los materiales en los que se encuentran englobados.

Por último, es importante destacar que no se observa ningún indicio de laminación dentro de los nódulos, lo que podría ser coherente con un emplazamiento del nódulo desplazando a la roca encajante.

4.3. Características mineralógicas y geoquímicas

Las tendencias de evolución geoquímica se pueden explicar mineralógicamente. Si expresamos los contenidos de los elementos diagenéticos más significativos en un diagrama triangular en el que se representen los contenidos de Ca - Mg - Fe+Mn (figura 2) podemos observar que todas las muestras se sitúan en el dominio de los carbonatos puros y, además, las muestras de las distintas partes de los nódulos son de calcita con bajo contenido en magnesio (menor del 4% de MgCO_3 en solución sólida en la calcita); así pues, la única fase responsable del desarrollo de los nódulos parece ser calcita con bajo contenido en magnesio (tipo LMC).

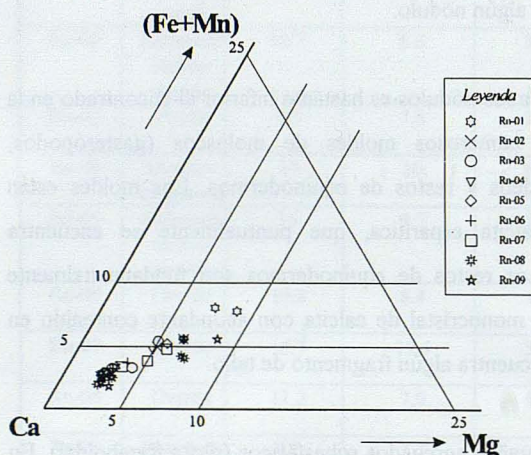


Figura 2. Variabilidad composicional de las muestras estudiadas, expresada en forma de diagrama triangular, utilizando como polos del mismo los datos analíticos del Ca, Mg y Fe+Mn.

Los nódulos están constituidos casi exclusivamente por calcita de textura microesparítica, y por pirita de tipo framboidal. La tendencia general en el interior de los nódulos es de una paulatina disminución del contenido en calcita de centro a borde y en el contenido de residuo insoluble hacia el exterior (figura 3).

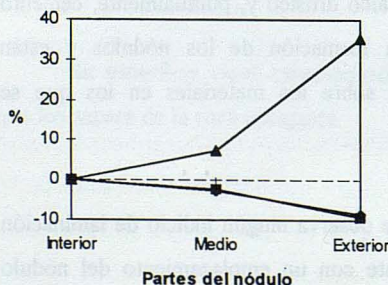


Figura 3. Porcentaje medio de variación, en el interior de los nódulos, del contenido en carbonato, calcio y residuo insoluble.

La gráfica que permite visualizar de una forma rápida el proceso de crecimiento de los nódulos es la relación existente entre el parámetro $\text{Ca}+\text{Mg}$ y el parámetro carbonato (figura 4). Estos parámetros geoquímicos presentan una relación inversa, de tal modo que se observa cómo el nódulo se va empobreciendo en carbonato, calcio y magnesio hacia la periferia.

Por último, el parámetro Mn/Fe (figura 5), presenta una tendencia negativa desde el interior de los nódulos hasta la roca encajante.

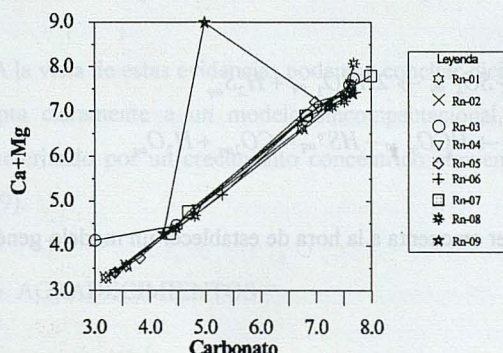


Figura 4. Gráfico de correlación entre el parámetro $\text{Ca}+\text{Mg}$ y el parámetro carbonato para cada una de las muestras estudiadas.

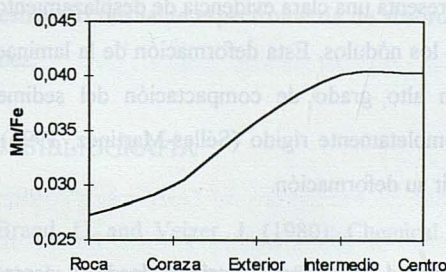
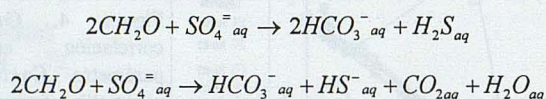


Figura 5. Variación media del parámetro geoquímico Mn/Fe en las diferentes zonas de los nódulos y en la roca encajante.

5. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

La distribución de nódulos carbonatados en las calizas y margas de la Formación Turmiel en la zona de Ricla está controlada por dos factores: las aguas intergranulares atrapadas en los sedimentos, que poseían un alto contenido en carbonato, y el producto de la descomposición de la materia orgánica por la acción bacteriana.

Este último aporte se adecúa a la utilización por parte de las bacterias del azufre existente en el medio, ya que el azufre, que forma parte de la cisteína, adenosinas, ácido lipóico, varias enzimas y otros componentes orgánicos vitales, suministra a las bacterias energía y oxígeno a partir de sus compuestos oxidados. La reducción de sulfatos a sulfuros está estrechamente ligada con la descomposición de la materia orgánica, que actúa como agente reductor real, produciendo CO_2 o HCO_3^- . El principal tipo de bacterias canalizadoras del proceso son las *Desulfovibrio*, cuyas condiciones de desarrollo más favorables, en cuanto a Eh y pH, se corresponden con las del campo de la pirita (existente en las muestras estudiadas). Las reacciones que se producen pueden asimilarse, de forma generalizada con:



Los aspectos más relevantes a tener en cuenta a la hora de establecer un modelo genético son:

- La desviación de las láminas alrededor de los nódulos, envolviéndolos, sin observarse láminas que los corten. Esto representa una clara evidencia de desplazamiento de la roca encajante durante el crecimiento de los nódulos. Esta deformación de la laminación podría haber ocurrido, en parte, con un alto grado de compactación del sedimento englobante, pero antes de que quedara completamente rígido (Sélles-Martínez, 1996); es decir, con suficiente plasticidad para permitir su deformación.

- El aumento sistemático en la cantidad de material detrítico desde el centro al exterior sugiere que el grado de compactación experimentado previo a la cementación fué menor en el centro que en los bordes (Raiswell, 1971; Criss *et al.*, 1988; entre otros).

- La idea de un aumento en el enterramiento durante el crecimiento de los nódulos está apoyada por la tendencia negativa de la relación Mn/Fe (figura 5), la cual decrece con el enterramiento (Curtis *et al.*, 1986a y b).

- Los nódulos presentan un contenido en carbonato y en calcio más elevado en el centro y va disminuyendo progresivamente hacia la periferia. Esta tendencia negativa hacia el exterior de las concreciones refleja una reducción progresiva de la porosidad (Gautier, 1982a y b; Mozley y Burns, 1993a y b; entre otros).

- Los nódulos no presentan ningún tipo de zonación interna, como es característico en este tipo de estructuras diagenéticas. Lo único que se observa es el aumento sistemático de la cantidad de material detrítico hacia la periferia de los nódulos, como resultado del desplazamiento de la roca encajante durante su crecimiento.

A la vista de estas evidencias podemos concluir diciendo que el génesis de los nódulos se adapta claramente a un modelo sincompactacional, con un crecimiento desplazante y caracterizado por un crecimiento concéntrico convencional (Torrijo *et al.*, 1997; Torrijo, 1999).

6. AGRADECIMIENTOS

Queremos agradecer la colaboración de Laboratorios Proyex, S.A. en la determinación de estroncio mediante espectrometría de absorción atómica y de manera especial a M^a Paz Ibañez.

7. BIBLIOGRAFÍA

Brand, U. and Veizer, J. (1980): Chemical diagenesis of a multicomponent carbonate system-1: Trace elements. *Jour. Sed. Petrol.*, 50(1), 219-236.

Criss, R.E., Cooke, G.A. and Day, S.D. (1988): An organic Origin for the Concretion of the Ohio Shale. *U.S. Geol. Survey Bull.*, 1836, 21 pp.

Curtis, C.D., Coleman, M.L. and Gautier, D.L. (1986a). Controls on the precipitation of early diagenetic calcite, dolomite and siderite concretions in complex depositional

sequences. In: *Roles of Organic Matter in Sedimentary Diagenesis*. Soc. Econ. Paleont. Mineral. Spec. Publ. pp. 23-33.

Curtis, C.D., Coleman, M.L. and Love, L.G. (1986b): Pore water evolution during sediment burial from isotopic and mineral chemistry of calcite, dolomite and siderite concretions. *Geoch. Cosmoch. Acta*, 50, 2321-2334.

Dean, W.E. (1974): Determination of carbonate and organic matter in calcareous sediments and sedimentary rocks by loss on ignition: comparison with other methods. *Jour. Sed. Petrol.*, 44, 242-248.

Gautier, D.L. (1982a): Siderite concretions: indicators of early diagenesis in the Gammon Shale (Cretaceous). *Jour. Sedim. Petrol.*, 52, 859-871.

Gautier, D.L. (1982b): Siderite concretions, indicators of early diagenesis in shallow gas reservoirs of the Gammon Shale (Cretaceous). *Eleventh International Congress on Sedimentology*.

Goy, A., Gómez, J.J. y Yébenes, A. (1976). El Jurásico de la Rama Castellana de la Cordillera Ibérica (mitad norte). I. Unidades Litoestratigráficas. *Estudios Geol.*, 32, 391-423.

Goy, A., Martínez, G. y Ureta, M.S. (1988). Bioestratigrafía del Toarciense y Aalenense en el sector comprendido entre La Almunia de Doña Godina y Ricla (Provincia de Zaragoza). *III Coloquio de Estratigrafía y Paleogeografía del Jurásico de España*. Instituto de Estudios Riojanos, Logroño. 237 -250.

Martínez, G. (1986). *El Toarciense en el sector comprendido entre La Almunia de Doña Godina y Ricla (Provincia de Zaragoza) - Paleontología (Ammonoidea) y Bioestratigrafía*. Tesis de Licenciatura, Universidad Complutense de Madrid (Facultad de Ciencias Geológicas). 254 pp. (No publicada).

Mozley, P.S. and Burns, S.J. (1993a): Oxygen and carbon isotopic composition of marine carbonate concretions: An overview. *Jour. Sed. Petrol.*, 63(1), 73-83.

Mozley, P.S. and Burns, S.J. (1993b): Oxygen and carbon isotopic composition of marine carbonate concretions: An overview. Reply. *Jour. Sed. Petrol.*, 63(5), 1008.

Raiswell, R. (1971): The Growth of Cambrian and Liassic concretions. *Sedimentology*, 17, 147-171.

Sellés-Martínez, J. (1996). Concretion morphology, classification and genesis. *Earth-Science Reviews*, 41, 177-210.

Torrijo, F.J.; Mandado Collado, J.; Joven Barcelona, R.B. y Sanz Morales, F.J. (1997): Nódulos y concreciones. Modelos genéticos. *Rev. Academia de Ciencias*. Zaragoza, 52, 159-169.

Torrijo, F.J (1999): Nódulos y concreciones carbonatadas. Distribución y génesis. *Tesis de Licenciatura. Universidad de Zaragoza*. 201 pp. (No publicada).

INTRODUCCIÓN

El análisis de toda muestra geológica proporciona una gran cantidad de información sobre los elementos en las muestras. La precisión y exactitud de los análisis son factores imprescindibles a conocer para poder valorar la fiabilidad de los resultados. Solo si los datos ajustan a la realidad de los datos obtenidos anteriormente puede proporcionar datos válidos para la elaboración de conclusiones.

En geoquímica ambiental el control de calidad es especialmente necesario por dos razones. En primer lugar, el método analítico empleado es ciego y llevado a cabo en virtud de una

**CONTROL DE LA CALIDAD DE DATOS GEOQUÍMICOS.
APLICACIÓN A LA RED DE DRENAJE DE LA CUENCA ALTA DEL RÍO
HUERVA (CORDILLERA IBÉRICA).**

P. Acero Salazar, J. Mandado Collado, F. J. Sanz Morales y F. J. Torrijo Echarri.*

* Área de Petrología y Geoquímica. Departamento de Geología. Universidad de Zaragoza.
C/ Pedro Cerbuna 12, 50009 ZARAGOZA.

Abstract:

Analysis of variance is a rapid and simple method in the quality control of large ammounts of geochemical data.

In this paper we explain and apply the methodology of a three-level analysis of variance and some related statistical parameters to the quality control of geochemical data of Cd, Cu, Pb and Zn in the fine river sediments of Huerva river (Iberian Range, Spain).

1. INTRODUCCIÓN

El análisis de toda muestra geológica proporciona unos datos numéricos sobre el contenido de determinados elementos en las muestras. La precisión y exactitud de los análisis son parámetros imprescindibles a conocer para poder valorar la fiabilidad de los resultados. Sólo un buen ajuste a la realidad de los datos obtenidos analíticamente puede proporcionar claves válidas para la elaboración de conclusiones.

En geoquímica ambiental el control de calidad es especialmente necesario por dos razones. En primer lugar, el método analítico empleado es elegido y llevado a cabo en virtud de una

relación coste/efectividad, lo que implica generalmente el empleo de "atajos" y aproximaciones que restan gran parte de sus refinamientos potenciales, acercándose a un límite inferior de tolerabilidad sin arriesgar los resultados (Thomson, 1983). En segundo lugar, se requiere disponer de unos límites de confianza en los que enmarcar los resultados, valorándolos en su justa medida como criterio para extraer y evaluar las conclusiones pertinentes.

En este trabajo se aplicará el control de calidad a los datos analíticos de Cd, Cu, Pb y Zn en los sedimentos fluviales finos en la cabecera de la red de drenaje del río Huerva (Cordillera Ibérica, España).

2.-ANÁLISIS DE VARIANZA

Desde un punto de vista práctico, para conocer la precisión de un sistema analítico se debe evaluar la varianza global de los datos obtenidos en el laboratorio. El análisis de varianza ocupa un lugar destacado en los estudios geoquímicos, ya que permite diferenciar diversas fuentes de error según el programa de muestreo llevado a cabo. Para cubrir los objetivos de este estudio, hemos enfocado este tipo de análisis en la distinción entre variabilidad analítica y de muestreo (Michie, 1973; Garret, 1969, 1973, 1983; Miesch, 1976; Dijkstra, 1976).

Para pequeños conjuntos de datos, el control de la calidad de los datos se realiza mediante duplicación de las observaciones. En grupos de observaciones de gran tamaño, en los cuales un replicado total de las observaciones suele ser inviable por razones presupuestarias, la metodología habitual consiste en extraer de forma aleatoria un subconjunto de observaciones de la muestra a analizar y trabajar sobre el mismo.

Para diseños sencillos con duplicados de observaciones, Garret (1983) propone un análisis de varianza jerárquico con 3 niveles, en el cual se asume un modelo del tipo

$$X_i = \mu + \alpha_i + \epsilon$$

siendo X_i el resultado analítico obtenido para una observación i dada, α_i representa la variabilidad regional, μ la media regional y ϵ el conjunto de errores introducidos en el tratamiento y recogida de observaciones.

Este modelo (sintetizado en la tabla 1) supone que la concentración de un constituyente químico en la muestra es función de la concentración media en toda el área, más una desviación determinada por el punto donde la observación fué tomada, más un error aleatorio introducido por el sistema analítico. Los componentes de varianza se denotan entonces como

$$S_x^2 = S_\alpha^2 + S_\epsilon^2$$

donde S_α^2 es la componente de varianza debida a variabilidad regional y S_ϵ^2 la componente debida a diversas fuentes de error. Puesto que este último término representa la imprecisión analítica, su magnitud con respecto a la variabilidad regional, S_α^2 , constituye un indicador sencillo de la calidad de los datos.

El principal requisito de aplicabilidad de este modelo es la homogeneidad de las varianzas (Miesch, 1976; Garret, 1983). Cuando dicha homogeneidad no se produce, se puede recurrir a transformaciones de los datos que proporcionen distribuciones simétricas con respecto a la media (no sesgadas), como las transformaciones logarítmicas o el empleo de factores correctores.

3. DISEÑO DEL SISTEMA DE CONTROL DE CALIDAD

Para este estudio se dispone de resultados analíticos de Cu, Cd, Zn y Pb en los sedimentos fluviales finos del cauce alto del río Huerva (Cordillera Ibérica, España). La muestra estadística está constituida por 134 observaciones (o sucesos), consistente cada uno de ellos en unos 2 Kg de sedimento húmedo por cada punto de muestreo.

Tabla 1: Análisis de varianza jerárquico en tres niveles para diseños sencillos de replicados (tomado de Garret, 1983).

NIVEL	FUENTE	SUMA DE CUADRADOS	GRADOS DE LIBERTAD
0	Total	$SS_3 = \sum_{ij} X_{ij}^2 - T'$	$2N - 1$
1	Regional	$SS_1 = \sum_i (\sum_j X_{ij})^2 / 2 - T'$	$N - 1$
2	Analítica y de muestreo	$SS_2 = \sum_{ij} X_{ij}^2 - \sum_i (\sum_j X_{ij})^2 / 2$	N

$$T' = (X_{ij})^2 / 2N$$

$N = n^\circ$ de observaciones replicadas

X_{ij} son los resultados de análisis individuales (o sus valores transformados).

i varía entre 1 y N , j varía entre 1 y 2 (n° de análisis realizados).

NIVEL	SUMA DE CUADRADOS	GRADOS DE LIBERTAD	VARIANZA	COMPONENTE DE VARIANZA
1	SS_1	$N - 1$	$MS_1 = SS_1 / (N - 1)$	$S_a^2 = (MS_1 - MS_2) / 2$
2	SS_2	N	$MS_2 = SS_2 / N$	$S_e^2 = MS_2$

En el caso de Cu, Pb y Zn los mejores niveles de ajuste a la normalidad en el test χ^2 se producen para las poblaciones resultantes de la transformación logarítmica de los resultados analíticos. Para el Cd, se obtiene un buen nivel de ajuste para la población de resultados analíticos directos, por lo que, para este elemento, no se empleará ninguna transformación de los datos (ver tabla 2, donde además se muestran los parámetros estadísticos básicos para cada elemento).

Los resultados analíticos para ambos subconjuntos y para las muestras correspondientes de la población original, una vez convertidos a ppm de muestra sólida, aparecen detallados en la tabla 3.

Tabla 3: Resultados analíticos (en ppm de muestra sólida) para la población original y los subconjuntos de control empleados en el análisis de varianza.

MUESTRA	Zn	Cd	Cu	Pb	MUESTRA	Zn	Cd	Cu	Pb	MUESTRA	Zn	Cd	Cu	Pb
1	10,61	3,00	5,60	14,39	RE01	19,42	2,60	10,99	19,38	DUP01	26,24	2,40	9,40	16,60
2	15,24	3,40	9,20	22,20	RE02	16,07	3,40	9,00	21,99	DUP02	11,28	3,20	10,60	22,80
3	19,92	3,00	11,00	24,60	RE03	20,92	3,60	11,00	24,00	DUP03	25,75	3,20	13,60	25,39
4	45,39	2,99	11,38	30,94	RE04	38,75	3,00	10,80	28,39	DUP04	37,95	3,00	10,40	27,80
5	52,93	2,80	14,60	31,40	RE05	45,85	2,80	14,80	27,79	DUP05	55,10	2,80	13,20	29,60
6	30,69	2,60	9,80	29,79	RE06	24,11	2,80	9,60	24,39	DUP06	44,86	2,80	10,79	22,98
7	28,46	3,00	9,20	20,00	RE07	30,52	2,80	9,20	20,60	DUP07	17,58	2,60	7,40	21,59
8	16,19	3,19	10,58	16,97	RE08	16,85	3,20	10,40	18,99	DUP08	12,46	3,00	11,40	16,59
9	16,72	4,00	8,80	22,00	RE09	16,24	4,00	7,60	19,60	DUP09	15,71	3,59	7,59	23,96
10	16,22	3,20	9,00	21,60	RE10	16,02	3,00	8,00	18,60	DUP10	12,94	2,80	6,80	22,79
11	13,02	2,20	6,20	19,20	RE11	12,44	3,20	6,60	18,80	DUP11	11,81	2,60	5,60	22,38
12	27,00	2,60	10,59	19,19	RE12	24,58	2,60	9,80	20,00	DUP12	19,80	2,40	11,80	20,40
13	21,16	1,20	14,80	20,60	RE13	17,84	1,60	13,17	18,96	DUP13	11,80	1,40	15,97	19,76

4. PARÁMETROS INDICATIVOS DE LA CALIDAD DE LOS DATOS

Para estimar la calidad de los datos se han calculado los siguientes parámetros, a partir de las poblaciones con mejores ajustes a la normalidad o lognormalidad:

- **Componentes de varianza**, según se expone en la tabla 1.

- **Relaciones Fisher** entre la varianza de la muestra y la del subconjunto A de replicados para cada elemento analizado. La relación F de Fisher constituye un buen indicador de la representatividad del subconjunto de replicados, mayor cuanto más próximo a 1 es el cociente entre varianzas.

- **Coefficiente de variación** ($C = S / X$) en el que S es la desviación estándar del subconjunto B de replicados y X su media aritmética, como indicador de la precisión analítica, que es mayor cuanto más próximo a cero sea el valor de C.

- **Relación "v"** de Miesch (1976), que permite evaluar la veracidad de cualquier tipo de representación gráfica derivada de un conjunto de datos numéricos. Dicha relación viene dada por

$$v = S_{\alpha}^2 / S_{\epsilon}^2$$

Según Miesch (1976), dicha relación debe superar la unidad para que las relaciones indiquen, al menos de forma aproximada, el modelo de tendencias regionales y considera que valores superiores a 6 conducen a mapas muy satisfactorios, con alta resolución de variabilidades regionales.

5. RESULTADOS

Los resultados obtenidos para Cu, Cd, Zn y Pb (tablas 4 y 5) son bastante satisfactorios; el error total introducido en los datos se encuentra en torno al 15% (algo mayor para el Pb) con coeficientes de variación asociados siempre inferiores al 11%, que indican una buena precisión analítica. Las altas relaciones Fisher halladas para Cu y Pb son consecuencia de una escasa representatividad de las poblaciones de duplicados escogidas, cuyos contenidos para estos elementos son, en general, sensiblemente mayores que en el conjunto original, hecho que introduce un sesgo en los subconjuntos de control.

Tabla 4: Relaciones estadísticas para la evaluación de la calidad de los datos log(Cu), Cd, log(Zn) y log(Pb).

Elemento	Cu	Cd	Zn	Pb
v de Miesch	5,359	5,483	4,474	3,768
Relación Fisher	2,4	1,16	1,314	1,66
Coef.de variación	0,022	0,108	0,001	0,026

Por otra parte, una baja representatividad causada por contenidos más altos en las muestras de control para estos elementos no invalida los resultados obtenidos en el análisis de error. Miesch (1976) señala que el error tiende a ser aritméticamente proporcional a la cantidad de constituyente presente en las muestras, cuando éstas se analizan mediante métodos

espectrométricos. No es descabellado suponer que un subconjunto de control no sesgado y con contenidos menores pero más representativos arrojaría en todo caso menores porcentajes de error que los obtenidos.

En cuanto a la veracidad de las representaciones gráficas que se realicen para Cu, Zn, Cd, y Pb, los coeficientes v de Miesch son lo suficientemente altos como para asegurar una buena resolución en los mapas de variabilidad regional que se deriven de los resultados analíticos para estos elementos.

6. CONCLUSIONES

1- El análisis de varianza constituye una herramienta rápida y sencilla para el control de calidad de datos geoquímicos en amplias tandas de muestras, en las que el empleo de una duplicación total de las muestras suele ser inviable, bien por razones presupuestarias, bien por la propia naturaleza de las muestras.

2- El empleo de un análisis de varianza de tipo jerárquico presenta la ventaja adicional de permitir localizar las fuentes de error o, al menos, identificar la etapa del proceso de preparación y análisis de las muestras en la que los errores se dan en mayor medida. Esta *autoobservación crítica* resulta imprescindible en campañas geoquímicas por tres razones fundamentales:

- La necesidad de disponer de unos rangos de fiabilidad que permitan evaluar los datos geoquímicos en su justa medida antes de realizar cualquier otra operación estadística que pueda enmascarar la presencia de errores sistemáticos y, por supuesto, antes de la interpretación de los resultados.

- Los procedimientos de muestreo y preparación de las muestras de campo deben ser diferentes en función de la naturaleza del medio estudiado, los materiales empleados para el estudio y el tipo de elementos analizados, por lo que cualquier diseño metodológico requiere una puesta a punto para optimizar los resultados.

Tabla 5: Resultados del análisis de varianza para los datos $\log(\text{Cu})$, $\log(\text{Cd})$, $\log(\text{Zn})$ y $\log(\text{Pb})$.

$\log(\text{Cu})$	VARIANZA	grados libertad	compon.varianza	%
REGIONAL	0,024519494	12	0,011213517	84,274284
ANAL+MUESTREO	0,00209246	13	0,00209246	15,726716

$\log(\text{Cu})$	VARIANZA	grados libertad	%v.anal.+muestreo	%var. total
ANALÍTICA	0,000467439	13	22,3392182	3,513002093
MUESTREO(deducida)	0,001625021	13	77,6607818	12,21271427
ERROR TOTAL				15,726716

$\log(\text{Cd})$	VARIANZA	grados libertad	compon.varianza	%
REGIONAL	0,681572137	12	0,312305386	84,57448668
ANAL+MUESTREO	0,056961366	13	0,056961366	15,42553332

$\log(\text{Cd})$	VARIANZA	grados libertad	%v.anal.+muestreo	%var. total
ANALÍTICA	0,10281846	13	69,15626491	10,6672269
MUESTREO(deducida)	0,045857094	13	30,84373509	4,757810635
ERROR TOTAL				15,42553332

$\log(\text{Zn})$	VARIANZA	grados libertad	compon.varianza	%
REGIONAL	0,083469881	12	0,037539861	81,732735
ANAL+MUESTREO	0,008390159	13	0,008390159	18,267265

$\log(\text{Zn})$	VARIANZA	grados libertad	%v.anal.+muestreo	%var. total
ANALÍTICA	0,001326761	13	15,81330099	2,888657673
MUESTREO(deducida)	0,007063398	13	84,18669901	15,37860781
ERROR TOTAL				18,267265

$\log(\text{Pb})$	VARIANZA	grados libertad	compon.varianza	%
REGIONAL	0,010650707	12	0,004701407	79,024539
ANAL+MUESTREO	0,001247893	13	0,001247893	20,975461

$\log(\text{Pb})$	VARIANZA	grados libertad	%v.anal.+muestreo	%var. total
ANALÍTICA	0,000887009	13	71,08050431	14,9094632
MUESTREO(deducida)	0,000360884	13	28,91949569	6,065997434
ERROR TOTAL				20,975461

- El análisis de varianza jerárquico proporciona datos sobre la magnitud de las distintas componentes de varianza, imprescindibles para el cálculo de otros índices y parámetros indicativos de la calidad de los resultados. Como se ha mostrado en este trabajo, en la mayoría de los casos el cálculo de únicamente tres de estos parámetros (coeficiente de variación, relación Fisher y v de Miesch) es suficiente para caracterizar amplias tandas de datos geoquímicos

BIBLIOGRAFÍA

- DIJKSTRA, S. (1976): Simple uses of covariograms in geology. *Geol. Mijnbouw*, 55 (1/2); 105-109.
- GARRET, R.G. (1969): The determination of sampling and analytical errors in exploration geochemistry. *Econ. Geol.* 64 (5); 568-569.
- GARRET, R.G. (1973): The determination of sampling and analytical errors in exploration geochemistry-a reply. *Econ. Geol.* 68 (2); 282-283.
- GARRET, R.G. (1983): Sampling methodology. In: G.J.S. GOVETT (Ed.): *Statistical and data analysis in Geochemical Prospecting*. Ed. Elsevier, Handbook of Expl. Geochem. Vol. II; 83- 110.
- MICHIE, U.D. (1973): The determination of sampling and analytical errors in exploration geochemistry- Discussions. *Econ. Geol.*, 68 (2); 281-282.
- MIESCH, A.T. (1976): Geochemical survey of Missouri, Methods of sampling laboratory analysis and statistical reduction of data. *U.S. Geol. Surv., Prof. Paper*, 954-A, 39 pp.
- THOMSON, M. (1983): Control procedures in geochemical analysis. In: G.J.S. GOVETT (Ed.): *Statistical and data analysis in Geochemical Prospecting*. Ed. Elsevier. Handbook of Expl. Geochem. Vol. II; 39-58.

1. INTRODUCCIÓN

Una cuestión clave en la interpretación de datos geoquímicos es la elección de umbrales para discernir entre fondo geoquímico, entendido como el contenido medio de un elemento en un material geológico, y anomalía geoquímica positiva, como su valor anormalmente alto para ese elemento en ese contexto regional.

La principal dificultad que se plantea en la elección de este tipo de umbrales es la notable variabilidad de fondos geoquímicos existente entre áreas incluso petrográficamente próximas.

**ESTABLECIMIENTO DE LOS VALORES DE FONDO Y UMBRAL DE
ANOMALÍA GEOQUÍMICA: APLICACIÓN AL ESTUDIO DE LA CUENCA ALTA
DEL RÍO HUERVA (CORDILLERA IBÉRICA)**

P. Acero Salazar, J. Mandado Collado, F. J. Sanz Morales y F. J. Torrijo Echarri.*

* Área de Petrología y Geoquímica. Departamento de Geología. Universidad de Zaragoza.
C/ Pedro Cerbuna 12, 50009 ZARAGOZA.

Abstract:

This study presents a basic revision of two of the most common methods of selection of background and threshold values in exploration geochemistry; by means of "two standard deviation method" and by using logarithmic-probability graphs.

The second of these methods has been succesfully applied to the determination of background and threshold for the populations of Cd, Cu, Pb and Zn in the fine river sediments of Huerva river (Iberian Range, Spain).

1. INTRODUCCIÓN

Una cuestión clave en la interpretación de datos geoquímicos es la elección de umbrales para discernir entre fondo geoquímico, entendido como el contenido medio de un elemento en un material geológico, y anomalía geoquímica positiva, como un valor anormalmente alto para ese elemento en ese contexto regional.

La principal dificultad que se plantea en la elección de este tipo de umbrales es la notable variabilidad de fondos geoquímicos existente entre áreas incluso petrológicamente próximas,

por lo que, en términos estadísticos, es más adecuado establecer un rango de fluctuación para los valores de fondo y establecer como umbral su límite superior.

En este estudio se reseñaran dos de los métodos más usuales para el establecimiento de los valores de fondo y umbral de anomalía en campañas geoquímicas y se aplicará uno de ellos al estudio de un área concreta.

2. MÉTODOS DE SELECCIÓN DE VALORES DE FONDO Y UMBRAL

2.1. Método del umbral 2σ

Una forma habitual de proceder en estudios geoquímicos es tomar como umbral de anomalía geoquímica positiva el contenido medio en un elemento dado más dos desviaciones estándar. Este método, rápido y sencillo, tiene la ventaja de que su único requisito de aplicabilidad es la existencia de poblaciones de datos distribuidas normalmente o que, al menos, no presenten sesgo. No obstante, como ya apuntó Sinclair (1973), la elección de este umbral de anomalía es totalmente arbitraria, ya que no existe ninguna razón natural que indique que el conjunto de valores anómalos de una muestra geoquímica cualquiera represente el 2,3% de los valores altos.

2.2. Gráficos logarítmico-probabilísticos

Desde otro enfoque, la elección de umbrales puede llevarse a cabo con ayuda de gráficos logarítmico-probabilísticos (Tennant y White, 1959; Sinclair, 1973; Parslow, 1974). Este método se basa en la premisa de que las distribuciones sesgadas representan el solapamiento de dos o más poblaciones normales, que pueden ser discriminadas en función de algún tipo de medida de dispersión o centralización que las describa. La construcción del gráfico sigue los siguientes pasos:

1º- Transformación logarítmica de los datos y representación frente a una escala probabilística de frecuencia acumulada. En estas condiciones toda población (log)normal genera una recta sobre la que se puede leer directamente en el gráfico la media geométrica

(valor en el percentil 50). Las desviaciones de una línea recta indican la mezcla de dos o más poblaciones en función de los puntos de inflexión observados.

2º- Examen de la distribución de los datos: En este punto se puede considerar a las regiones rectas del gráfico como poblaciones (log)normales independientes, mientras que las regiones curvas representan las zonas de mezcla entre poblaciones solapadas o, en otras palabras, el rango de fluctuación del umbral que separa ambas poblaciones.

Este método únicamente es fiable para poblaciones constituidas por más de 100 observaciones. En los casos en que estas condiciones no se cumplen resulta preferible el empleo de otro tipo de métodos de selección de anomalías, como el método del umbral 2σ explicado anteriormente.

3. APLICACIÓN AL ESTUDIO DE LA CUENCA ALTA DEL RÍO HUERVA

Para este trabajo se dispone de resultados analíticos de Cu, Cd, Pb y Zn procedentes de la extracción con HNO_3 en 134 muestras de sedimentos fluviales finos de la red de drenaje del río Huerva (Cordillera Ibérica, España).

En este caso se dispone de un elevado número de muestras (mayor que 100), por lo cual, como ya se explicó anteriormente, es preferible realizar la selección de los valores de fondo y umbral de anomalía mediante la interpretación de gráficos logarítmico-probabilísticos.

Las representaciones realizadas para cada elemento estudiado, así como las interpretaciones derivadas de las mismas aparecen detallados a continuación:

- Para el **cadmio** (figura 1), el grado de solapamiento entre poblaciones es tan elevado que la representación de Sinclair para este elemento forma una curva prácticamente continua entre los valores extremos, por lo que resulta muy difícil diferenciar puntos de inflexión. Únicamente se diferencia un tramo recto (valores superiores a 3.2 ppm), en lo que interpretamos como población posiblemente anómala.

Hemos situado dos puntos de inflexión, que marcan los límites entre tres poblaciones, a las que llamaremos A, B y C, cuyos límites, porcentajes del total y denominaciones aparecen expresados en la tabla 1. La diferenciación y límites entre las poblaciones A y B no es clara, por lo que el valor escogido como umbral entre ambas no debe ser tomado como un valor estricto.

Tabla 1: Definición y nomenclatura de las poblaciones diferenciadas para el cadmio.

POBLACIÓN		LÍMITES	%
A	FONDO REGIONAL	< 1,8 ppm	7,46
B	MEZCLA A+C	entre 1,8 y 3,2 ppm	73,14
C	POSIBLE ANOMALÍA	> 3,2 ppm	17,16

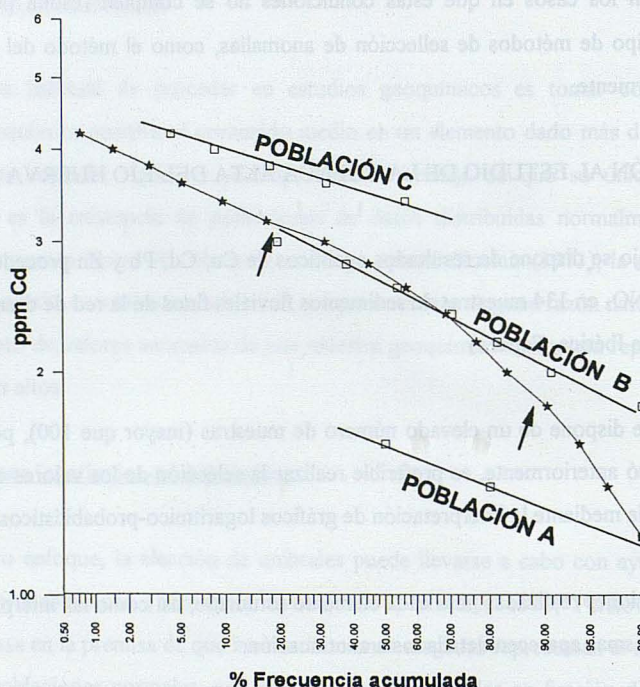


Figura 1: Representación de Sinclair para la distribución de valores de cadmio. Los puntos de inflexión, correspondientes a los límites entre poblaciones distintas aparecen marcados con flechas.

- Para el **cobre** y el **zinc**, las representaciones de Sinclair forman líneas muy complejas, que indican la existencia de un alto grado de mezcla entre poblaciones, posiblemente como consecuencia de un gran número de fuentes de aporte diferenciadas.

Para el cobre, las características de la curva (figura 2) nos obligan a diferenciar al menos cuatro poblaciones complejas (tabla 2), constituidas a su vez por varias subpoblaciones indiferenciables a esta escala, y muy solapadas entre sí. El umbral de posible anomalía positiva queda situado en 16 ppm.

En el caso del zinc (figura 3) únicamente hemos diferenciado tres poblaciones (tabla 3) que, al igual que ocurría con el cobre, están formadas por subpoblaciones indiferenciables, con alto grado de solapamiento. El límite inferior de la población C, que marca el umbral de posible anomalía, se sitúa en 59 ppm.

Tabla 2: Definición y nomenclatura de las poblaciones diferenciadas para el cobre.

	POBLACIÓN	LIMITES	%
A	FONDO REGIONAL	< 8 ppm	43,93
A'	ALTO FONDO REGIONAL	entre 8 y 12 ppm	47,02
B	MEZCLA A'+C	entre 12 y 16 ppm	5,22
C	POSIBLE ANOMALÍA	>16 ppm	3,73

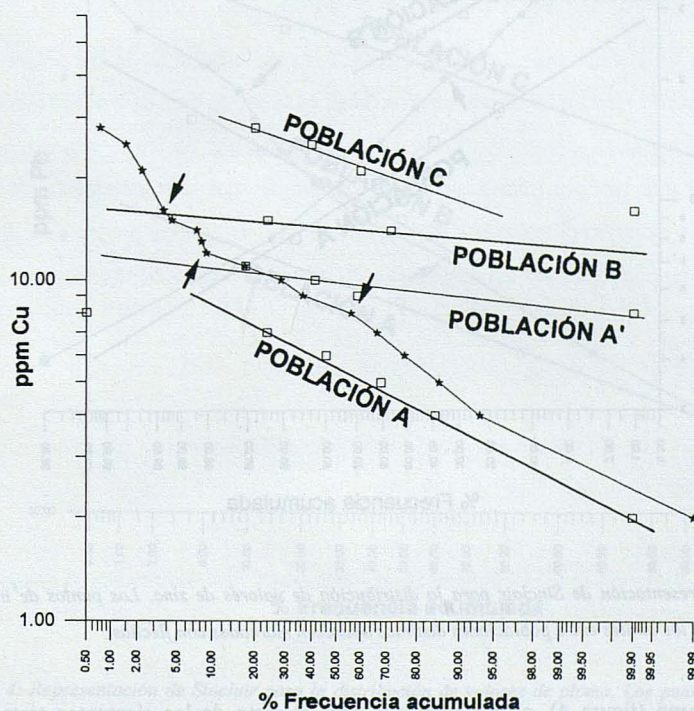


Figura 2: Representación de Sinclair para la distribución de valores de cobre. Los puntos de inflexión, correspondientes a los límites entre poblaciones distintas aparecen marcados con flechas.

Tabla 3: Definición y nomenclatura de las poblaciones diferenciadas para el zinc.

	POBLACIÓN	LÍMITES	%
A	FONDO REGIONAL	< 20 ppm	64,93
B	MEZCLA A+C	entre 20 y 59 ppm	32,07
C	POSIBLE ANOMALIA	> 59 ppm	3

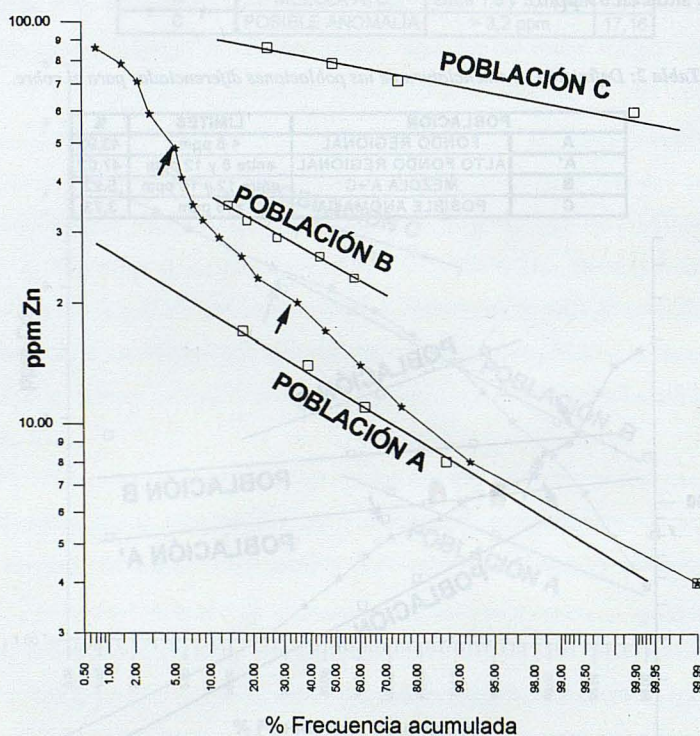


Figura 3: Representación de Sinclair para la distribución de valores de zinc. Los puntos de inflexión, correspondientes a los límites entre poblaciones distintas aparecen marcados con flechas.

- Para el **plomo** (figura 4), al contrario que para el resto de los elementos tratados, la representación obtenida muestra dos truncaduras bastante netas, que permiten situar con bastante precisión los límites entre tres poblaciones bien diferenciadas; población A de fondo regional, población C de muestras posiblemente anómalas y población B de mezcla o

solapamiento entre las dos anteriores. El umbral de posible anomalía positiva (ver tabla 4), marcado por el límite inferior de la población C, queda situado en 29 ppm.

Tabla 4: Definición y nomenclatura de las poblaciones diferenciadas para el plomo.

POBLACIÓN		LIMITES	%
A	FONDO REGIONAL	< 14 ppm	36,57
B	MEZCLA A+C	entre 14 y 29 ppm	54,47
C	POSIBLE ANOMALIA	> 29 ppm	8,96

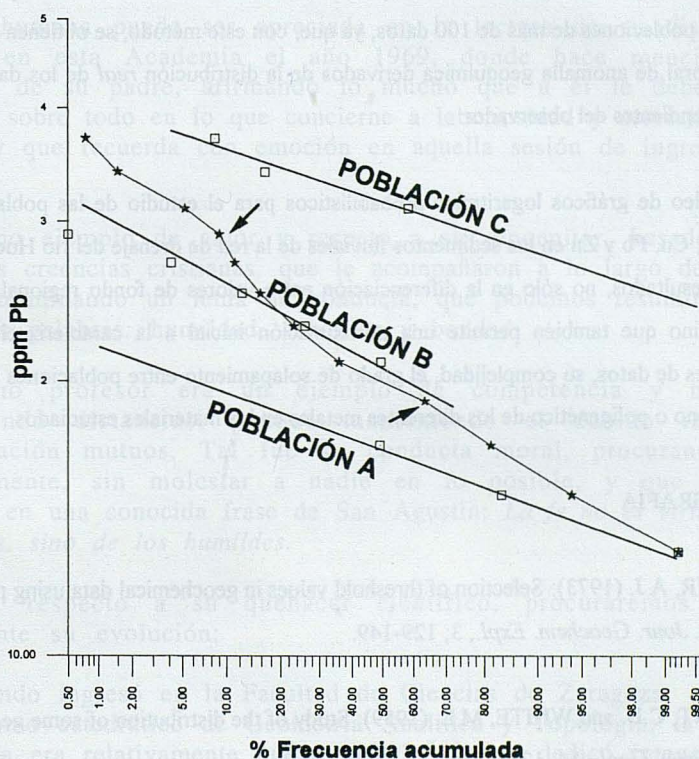


Figura 4: Representación de Sinclair para la distribución de valores de plomo. Los puntos de inflexión, correspondientes a los límites entre poblaciones distintas aparecen marcados con flechas.

3. CONCLUSIONES

El establecimiento de los valores de fondo y umbral de anomalía en campañas geoquímicas se puede llevar a cabo, al menos, por dos métodos sencillos:

- Método de umbral 2σ , cuando se dispone de pequeñas tandas de datos distribuido según pautas (log)normales o ligeramente sesgadas.
- Gráficos logarítmico-probabilísticos, preferibles al método anterior siempre que se disponga de poblaciones de más de 100 datos, ya que, con este método, se obtienen valores de fondo y umbral de anomalía geoquímica derivados de la distribución *real* de los datos y, por tanto, independientes del observador.
- El empleo de gráficos logarítmico-probabilísticos para el estudio de las poblaciones de datos de Cd, Cu, Pb y Zn en los sedimentos fluviales de la red de drenaje del río Huerva arroja excelentes resultados, no sólo en la diferenciación entre valores de fondo regional y valores anómalos, sino que también permite una aproximación inicial a la caracterización de las distribuciones de datos, su complejidad, el grado de solapamiento entre poblaciones distintas y el origen mono o poligenético de los diferentes metales en los materiales estudiados.

BIBLIOGRAFÍA

SINCLAIR, A.J. (1973): Selection of threshold values in geochemical data using probability graphs. *Jour. Geochem. Expl.*, 3; 129-149.

TENNANT, C.B. and WHITE, M.L. (1959): Study of the distribution of some geochemical data. *Econ. Geol.*, 54; 1281-1290.

PARSLOW, G.R. (1974): Determination of background and threshold in exploration geochemistry. *Jour. Geochem. Expl.*, 3; 319-336.

Notas necrológicas

El día 28 de agosto de 1998 fallecía en Zaragoza nuestro querido compañero D. Antonio Plans Sanz de Bremon a los 76 años de edad. D. Antonio había nacido en Madrid el 12 de enero de 1922. Su padre D. Antonio Plans y Freyre, catedrático de Mecánica, que fue de esta Universidad, era uno de los Académicos fundadores de esta Academia en el año 1916.

En esta breve nota necrológica procuraremos exponer dos facetas que adornaron al Dr. Plans a lo largo de su vida: la humana y la científica.

La humana puede ser apreciada en la lectura de su discurso de ingreso en esta Academia el año 1969, donde hace mención a la memoria de su padre, afirmando lo mucho que a él le debe por su ejemplo, sobre todo en lo que concierne a laboriosidad y servicio por los demás, y que recuerda con emoción en aquella sesión de ingreso a sus 47 años.

Digno ejemplo de amor y respeto a su progenitor, basado en sus profundas creencias cristianas, que le acompañaron a lo largo de toda su vida, determinando un lema de conducta, que podemos resumir con las siguientes palabras: humildad, sencillez y bondad.

Como profesor era un ejemplo de competencia y humildad, suprimiendo distancias, aunque manteniendo el debido respeto y consideración mutuos. Tal fue su conducta moral, procurando pasar discretamente, sin molestar a nadie en lo posible, y que podemos recordar en una conocida frase de San Agustín: *La fe no es virtud de los soberbios, sino de los humildes.*

Con respecto a su quehacer científico, procuraremos exponer brevemente su evolución:

Cuando ingresó en la Facultad de Ciencias de Zaragoza, en el año 1957, como catedrático de Geometría Analítica y Topología, la rama de Topología era relativamente nueva, por lo que se dedicó intensamente a su desarrollo, manteniendo numerosos contactos con las Universidades de Heidelberg y Maguncia en Alemania.

Más tarde orientó sus investigaciones al campo de los espacios de Hilbert, donde la autoridad alcanzada por el Dr. Plans en esta especialidad, quedó no solamente confirmada por sus numerosos trabajos, sino por las muchas invitaciones recibidas desde Alemania para exponer los resultados de sus investigaciones, que tuvieron gran

difusión en otros países europeos. A este respecto recordemos que su discurso de ingreso en nuestra Academia se titulaba: El espacio de Hilberg.

A partir del año 1980 orientó sus investigaciones hacia el campo de los espacios de Banach, en los cuales trabajaba al producirse su fallecimiento.

Son incontables los trabajos publicados en revistas nacionales y extranjeras, así como el número de tesis doctorales dirigidas, de cuyos discípulos han surgido Catedráticos y Profesores Titulares de Universidad.

Deseamos que con esta exposición recordatoria, hayamos podido plasmar sus virtudes humanas y su dedicación científica, que cumplían, repetimos, las directrices santificantes, rectoras en su vida de apostolado. Descanse en la paz del Señor nuestro bien querido compañero.

El día 14 de diciembre de 1998, fallecía en Zaragoza nuestro querido compañero D. Justiniano Casas Pelaez, a los 83 años de edad.

D. Justiniano había nacido en el pueblo de Granucillo de Vidriales, de la provincia de Zamora, el día 25 de febrero de 1915.

En principio fue Maestro Nacional, ejerciendo en diversos pueblos de Palencia, al tiempo que simultaneaba sus estudios de Licenciatura en Ciencias Exactas, que terminó el año 1946. Más tarde se incorporó a la Facultad de Ciencias de Madrid como Profesor Ayudante, doctorándose posteriormente en la Sección de Físicas el año 1951.

Sus primeras investigaciones se efectuaron en el Consejo Superior de Investigaciones Científicas, como Investigador del Instituto de Optica Daza Valdes, donde se formó en esta rama, por lo que más tarde gana en 1954 la plaza de Catedrático de Optica, vacante en la Facultad de Ciencias de Zaragoza.

Su incorporación dió como resultado, un resurgir de la Sección de Físicas de nuestra Universidad, que por diversas causas se encontraba en un estado inoperante.

Su gran vitalidad determinó la construcción de un Espectrómetro de Masas y la creación de un grupo de Separación de isótopos, así como el gran impulso que dió a los estudios de óptica, con la dirección de

numerosas tesis doctorales y la publicación de más de un centenar de trabajos científicos.

Ingresó en la Academia de Ciencias el 6 de febrero de 1966, siendo su discurso de ingreso: Formación y valoración de la imagen optica, que fue contestado por el Excmo. Sr. D. Juan Cabrera y Felipe.

Era de carácter abierto, en el que se mezclaba la tierra zamorana de su nacimiento, a la que acudía todos los años, con el carácter que le inculcó Aragón durante su dilatada estancia en Zaragoza. Esta afabilidad no estaba reñida con la energía que mostró a lo largo de los años, por lo que fue elegido Decano y Rector de nuestra Universidad entre los años 1968-72. Durante su mandato tuvo que afrontar con energía los problemas escolares que por entonces reinaban en las universidades españolas. Por su gestión logró de Madrid que se construyera el edificio Interfacultades, el del Rectorado y el del Colegio Mayor Santa Isabel, consiguiendo el dinero necesario para la construcción de la Facultad de Medicina y la del nuevo Hospital clínico.

Más tarde fue nombrado Presidente del Consejo Superior de Investigaciones Científicas y, finalmente, desde los años de 1975 a 1984 ostentó la Presidencia de nuestra Academia, logrando, con su intervención y sus conocimientos en Madrid, una potenciación económica de esta Institución.

Tras su jubilación fue nombrado Profesor Emérito, desarrollando una gran actividad, en la redacción de su Tratado de Optica, dirección de Tesis doctorales, conferencias, etc.

Son muchos los nombramientos y las distinciones recibidas, pero quizás la más emotiva, recibida días antes de su fallecimiento, en un impresionante acto claustral, en el que aun tuvo fuerzas para leer un discurso de agradecimiento, fue la concesión de la Medalla de Oro de la Universidad de Zaragoza.

En este breve resumen hemos querido exponer la fuerte vitalidad humana y científica de D. Justiniano Casas, al que deseamos descanse en la paz del Señor.

Horacio Marco Mol
Presidencia